

PLS

PLSはpartial least squares : 部分最小二乗法

Partial least squares (PLS)

- 部分最小二乗法は連立方程式を解く方法の一つ. (PLS1)
 - $y = XB$

$$\bullet y: \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} \quad X: \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdot & \cdot & x_{1m} \\ x_{21} & x_{22} & \cdot & \cdot & x_{2m} \\ & & \cdot & & \\ & & \cdot & & \\ x_{n1} & x_{n2} & \cdot & \cdot & x_{nm} \end{pmatrix}$$

$$\bullet B: \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ b_m \end{pmatrix}$$

$$\bullet y_1 = b_1 x_{11} + b_2 x_{12} + \cdot \cdot + b_m x_{1m}$$

- PLS1はXとyを線形分解します
 - $X = TP^t + E$ と $y = Tq + f$, ここで
 - T: スコア
 - P: X 負荷量 q: y 負荷量
 - E: X 残差 f: y 残差
- Tとyの共分散が最大になるように分解されます。

$$w = \frac{\mathbf{x}^T \mathbf{y}}{\|\mathbf{x}^T \mathbf{y}\|} \quad \mathbf{b} = \mathbf{W}(\mathbf{P}^T \mathbf{W})^{-1} \mathbf{q}$$

PLSの目的

• PLS で次の方程式を解きます

• $Y = XB$

• この例だと

- Y: ユーザー入力
- X: 各m/zの信号強度
- B: regression coefficient

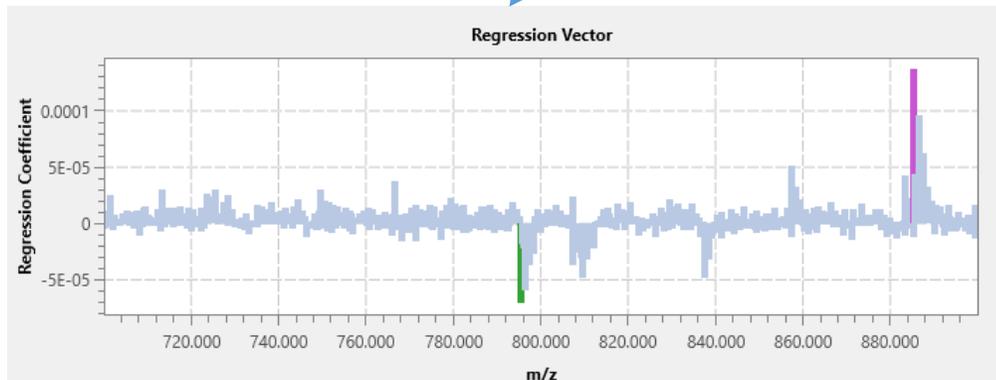
PLS Parameter

Number of Latent Variables: Auto Manual (5)

Pre-processing: Pareto Scale

ROI List

No.	File Name	ROI Name	Attribute	Y value
1	Testicle_9AA_Pi_SL_5x_1...	ROI001	Group A	1.00000
2	Testicle_9AA_Pi_SL_5x_1...	ROI002	Group B	0.00000
3	Testicle_9AA_Pi_SL_5x_1...	ROI003	Group C	0.00000

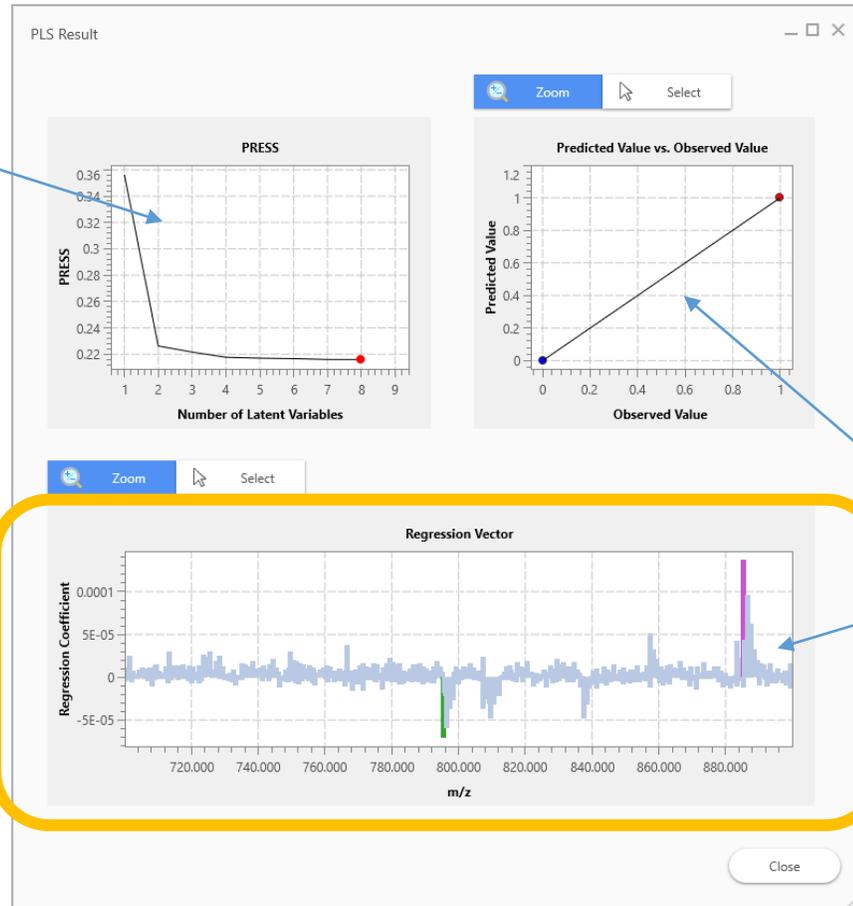


Data Matrix Table

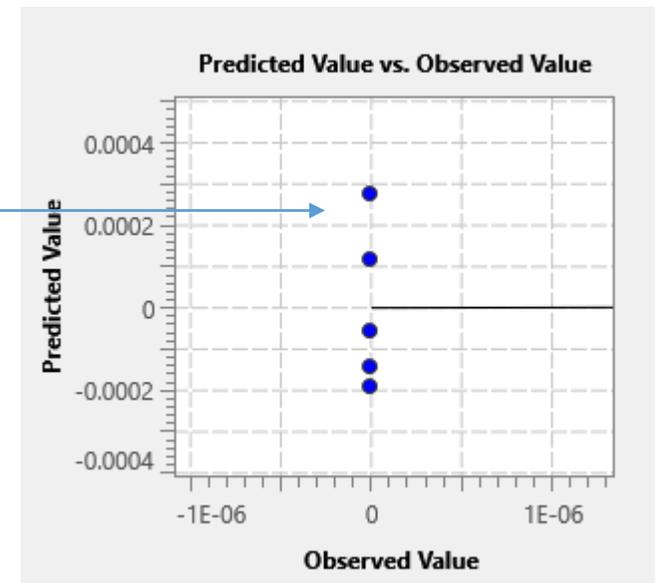
No.	Use	Tag	Label	m/z	ROI001	ROI002	ROI003
1	<input checked="" type="checkbox"/>		699.9849-700.1849	700.0849	1335.372	955.008	719.154
2	<input checked="" type="checkbox"/>		700.1849-700.3849	700.2849	3233.055	2285.856	4259.140
3	<input checked="" type="checkbox"/>		700.3849-700.5849	700.4849	7135.789	6658.481	6215.483
4	<input checked="" type="checkbox"/>		700.5849-700.7849	700.6849	350.186	557.643	704.661
5	<input checked="" type="checkbox"/>		700.7849-700.9849	700.8849	599.713	535.929	1297.413
6	<input checked="" type="checkbox"/>		700.9849-701.1849	701.0849	1603.896	1003.419	1719.029
7	<input checked="" type="checkbox"/>		701.1849-701.3849	701.2849	3562.864	3135.136	6112.206
8	<input checked="" type="checkbox"/>		701.3849-701.5849	701.4849	4053.940	4716.231	11056.985
9	<input checked="" type="checkbox"/>		701.5849-701.7849	701.6849	364.000	440.763	147.480
10	<input checked="" type="checkbox"/>		701.7849-701.9849	701.8849	547.404	453.994	1172.073
11	<input checked="" type="checkbox"/>		701.9849-702.1849	702.0849	1298.887	1064.758	1399.292
12	<input checked="" type="checkbox"/>		702.1849-702.3849	702.2849	2988.290	1353.019	2972.140
13	<input checked="" type="checkbox"/>		702.3849-702.5849	702.4849	2129.094	2368.437	5835.236
14	<input checked="" type="checkbox"/>		702.5849-702.7849	702.6849	205.491	299.329	127.194
15	<input checked="" type="checkbox"/>		702.7849-702.9849	702.8849	254.150	323.080	207.405
16	<input checked="" type="checkbox"/>		702.9849-703.1849	703.0849	1143.333	1304.598	1899.105
17	<input checked="" type="checkbox"/>		703.1849-703.3849	703.2849	2979.481	2536.971	3065.977
18	<input checked="" type="checkbox"/>		703.3849-703.5849	703.4849	4640.529	3625.504	6333.597
19	<input checked="" type="checkbox"/>		703.5849-703.7849	703.6849	383.706	380.487	874.887
20	<input checked="" type="checkbox"/>		703.7849-703.9849	703.8849	476.825	328.199	732.437

PLS の結果

幾つの潜在変数が予測
にいいか



“予測” は “計算結果” です



“観測値” は “入力値” です

$$Y = XB$$

回帰係数は“データ行列テーブル”にも表示されます。

データ行列テーブル

No.	使用	タグ	ラベル	m/z	PLS係数	<input checked="" type="checkbox"/> ROI001	<input checked="" type="checkbox"/> ROI006	<input checked="" type="checkbox"/> ROI007
1	<input checked="" type="checkbox"/>		699.9849-700.1849	700.0849	-1.031e-005	3826.025	7539.937	7142.123
2	<input checked="" type="checkbox"/>		700.1849-700.3849	700.2849	-1.036e-005	16109.992	23400.471	19211.543
3	<input checked="" type="checkbox"/>		700.3849-700.5849	700.4849	-1.959e-005	21877.961	42638.046	33311.234
4	<input checked="" type="checkbox"/>		700.5849-700.7849	700.6849	6.367e-006	1467.580	190.273	111.123
5	<input checked="" type="checkbox"/>		700.7849-700.9849	700.8849	-2.211e-006	1273.433	1008.485	201.123
6	<input checked="" type="checkbox"/>		700.9849-701.1849	701.0849	7.801e-006	7208.971	6658.819	301.123
7	<input checked="" type="checkbox"/>		701.1849-701.3849	701.2849	-2.411e-005	22713.335	30928.034	56211.123
8	<input checked="" type="checkbox"/>		701.3849-701.5849	701.4849	-1.822e-005	14148.507	55911.353	21411.123
9	<input checked="" type="checkbox"/>		701.5849-701.7849	701.6849	1.407e-006	2301.442	3029.906	1311.123
10	<input checked="" type="checkbox"/>		701.7849-701.9849	701.8849	-1.144e-005	855.183	5883.234	4911.123
11	<input checked="" type="checkbox"/>		701.9849-702.1849	702.0849	-4.200e-006	7153.956	20282.529	3811.123