

Scaleについて

Scaleを選択する箇所がいくつかある

PCAパラメータ

主成分数 自動 手動 5

前処理

- パレートスケール
- なし
- 中心化
- オートスケール
- パレートスケール**

PLSパラメータ

潜在変数の数 自動 手動 5

前処理

- パレートスケール
- なし
- 中心化
- オートスケール
- パレートスケール**

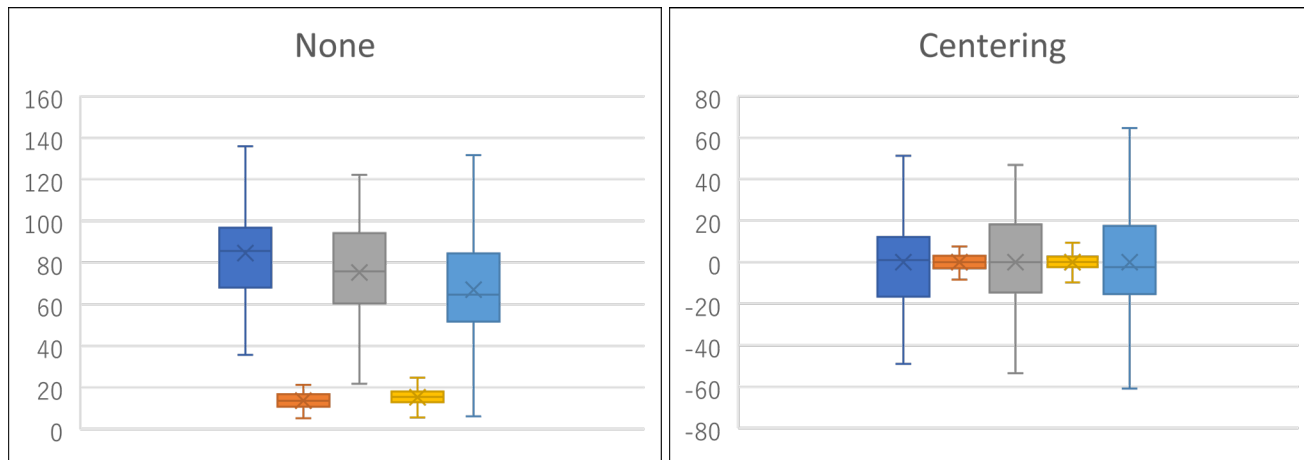
ROIリスト

Scaleについて

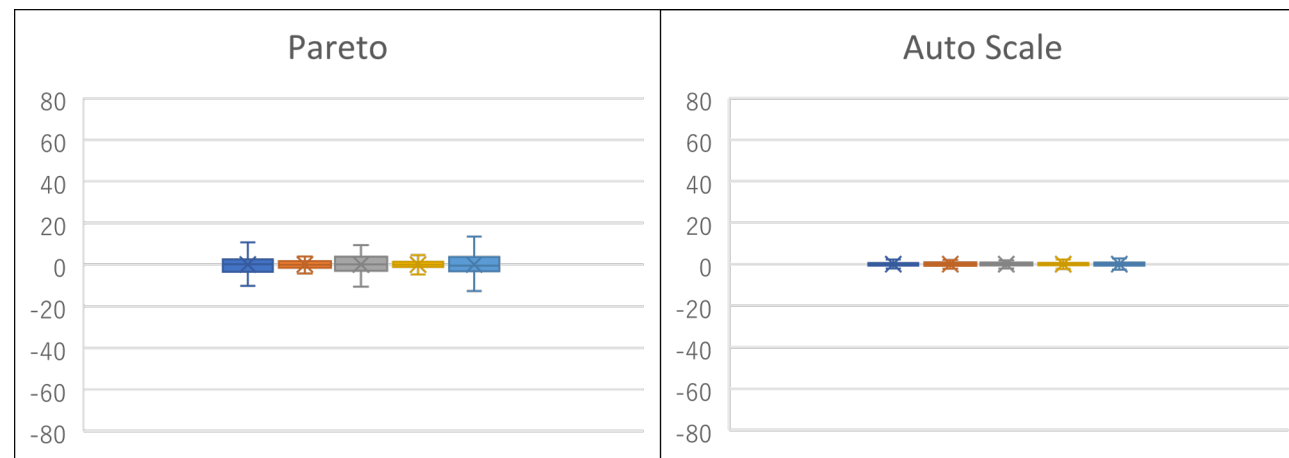
- Scaleの選択: 信号強度 X_i をどのように扱うか
 - なし : そのまま
 - 中心化 : 平均を0にする $X_i - \hat{X}$
 - パレートスケール : 変動幅による影響を緩和 $\frac{X_i - \hat{X}}{\sqrt{\sigma}}$
 - オートスケール : 変動幅による影響をなくす $\frac{X_i - \hat{X}}{\sigma}$

PCAの場合Score Plotは大して変わらないが、Loading Plotではデータ点の散らばり具合が変わる

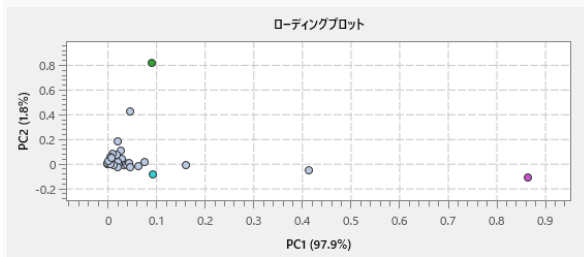
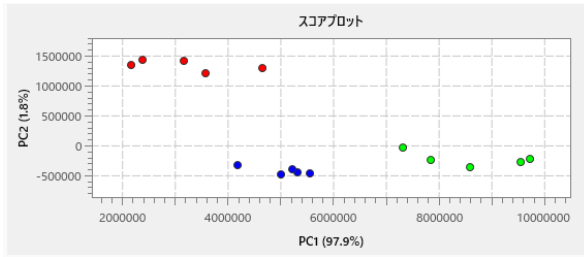
scaleのイメージ



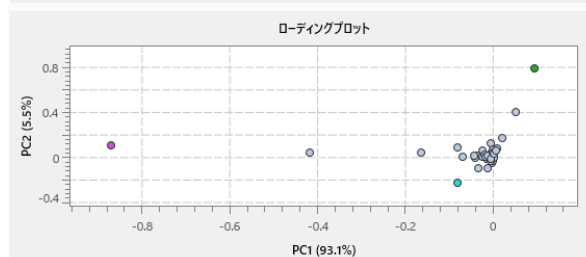
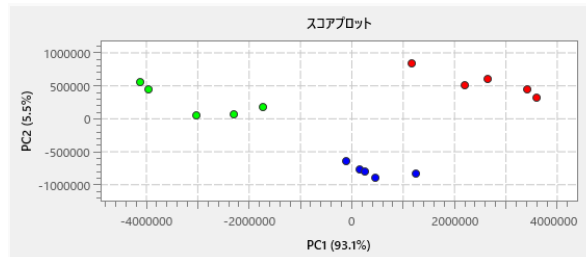
ばらつきは信号強度に比例するとする



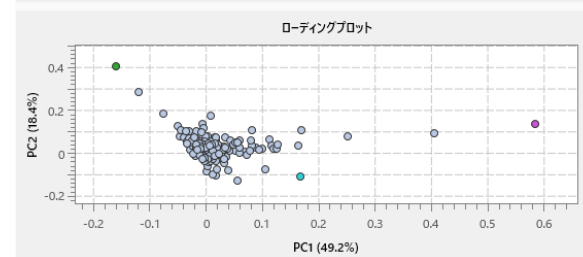
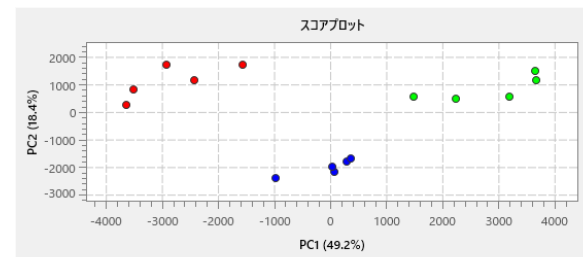
スケールを変更してPCAを行った例



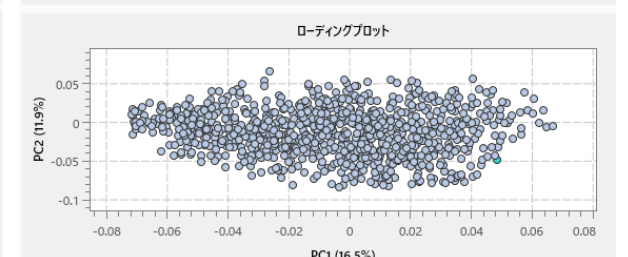
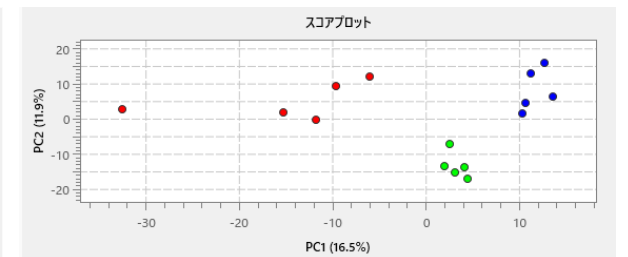
なし



中心化



パレート



オートスケール