



VEKTOR  
DIREKTOR™



探索的データ分析

Multivariate Analysis with Direction and Purpose  
For Windows OS

# VEKTOR DIREKTOR™

## 多変量データ解析ソフトウェア



推論統計学



多変量回帰



データ可視化

あらゆる種類のデータに対応する  
多変量データ解析ソフトウェアとして、  
使いやすさ向上と新たにデータの可視化を実現。

Your Data Our Software Your Success

KAX Group



## VEKTOR DIREKTOR TM

# 1

VEKTOR DIREKTORの  
使用環境と利用可能な機能の  
概要。

## Intelligent Workflow

# 2

データのインポート、  
可視化から解析・予測まで、  
VEKTOR DIREKTORは  
データの分析に広く活用可能。

## Your Data, Our Software Your Success

# 3

直感的で簡単な  
優れた操作性を持ち、  
より効果的なデータマイニングと  
それに基づく判断が可能に。

## Multivariate Analyses 多変量解析

# 4

大きな特徴である  
多変量解析(MVDA)は、  
探索的データ解析・多変量回帰・  
分類の機能を装備。

## Prediktive Analytix 予測分析

# 5

作成した多変量モデルを使って  
新たな実験データや  
オンライン・リアルタイムでの  
計測データとの特性値予測を  
行える。

# VEKTOR DIREKTOR™

あらゆる種類のデータに対応する  
多変量データ解析ソフトウェアの使いやすさと  
データの可視化に新たな基準を設定

*"Setting the new standard for ease of use and data visualisation in Multivariate Data Analysis Software for any type of data"*

## データのインポート



GRAMS



Brimrose



MicroNIR™ Pro



Excel

JCAMP

JCAMP-DX

synTQ

synTQ

一般的なファイル形式から特殊なフォーマットまで、様々なデータをドラッグ&ドロップで簡単にインポートが可能です。

クラス変数の定義や可視化しながらのデータのインポートを行うことで、より高品質な多変量解析が可能になります。

## ビジュアル化



Bubble



Column



Histogram



Line



Scatter



3D Surface

VEKTOR DIREKTORには非常に多くのプロットとデータ可視化のツールが備わっています。

プロットを作成し分析することで、データの解釈とそれに基づいて意思決定が可能になります。クラス変数を使ったグループプロットはデータの解釈とプレゼンテーション効果を高めます。

データのインポートから予測・分類まで、VEKTOR DIREKTORは直感的なワークフローによってデータを効果的に分析することができます

## データの前処理



Scaling



Baseline



Savitzky Golay

MSC

MSC



Normalisation



SNV

多変量解析においてデータの前処理は極めて重要なステップであり、解析ソフトには様々な前処理機能が求められます。

各種の前処理方法を組み合わせて、それをテンプレートとして保存することで、新たなデータセットにも簡単に適用することができます。

## 分析



ANOVA



Statistical



PCA



PLSR



PLS-DA



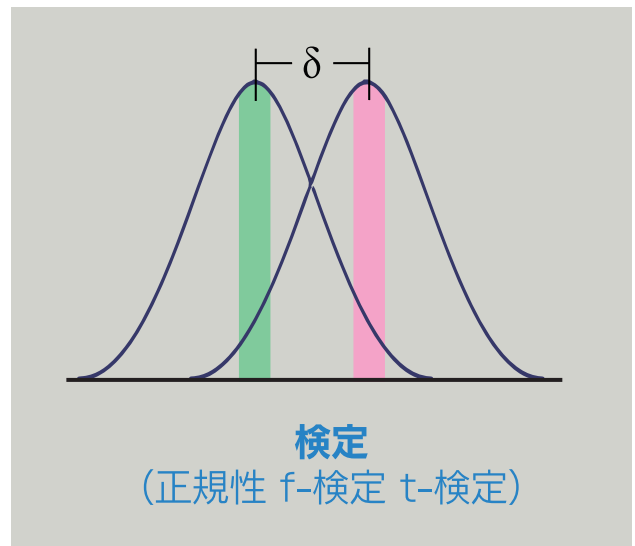
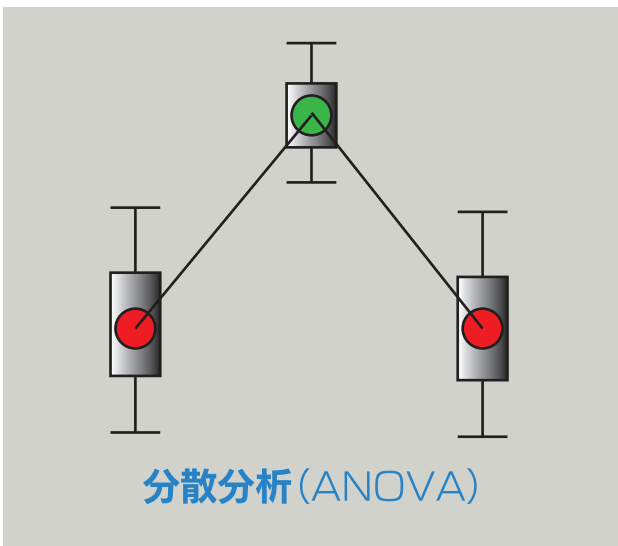
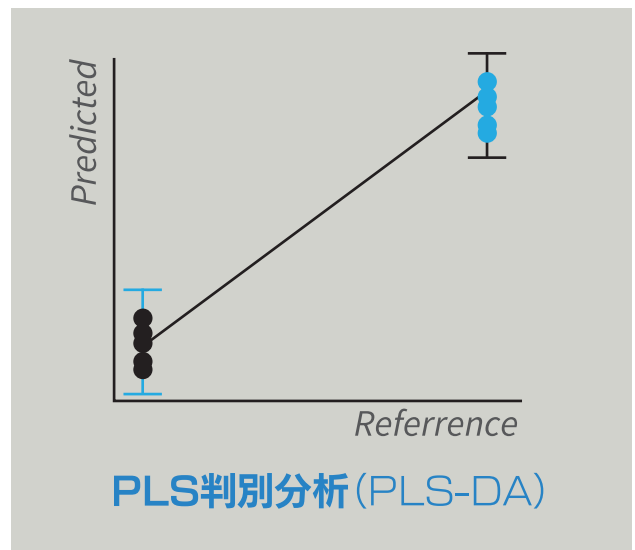
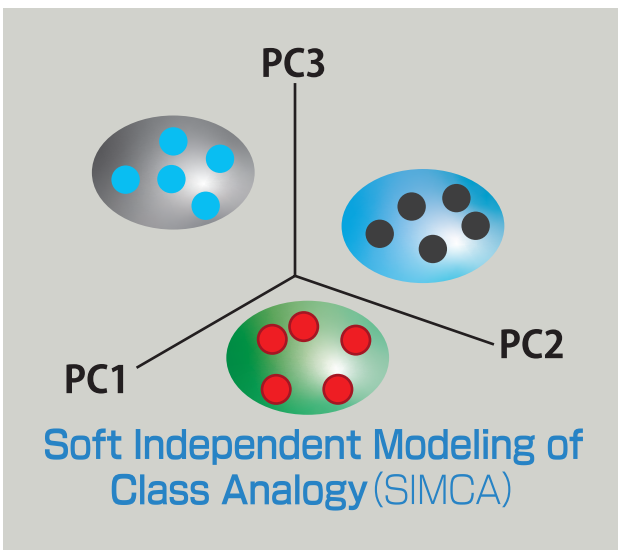
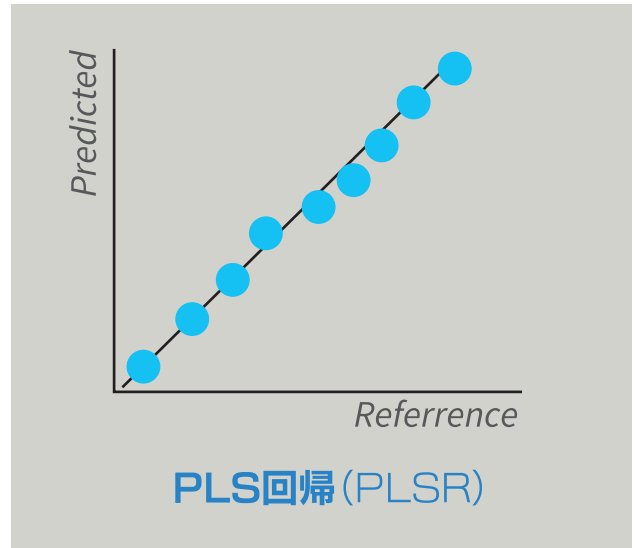
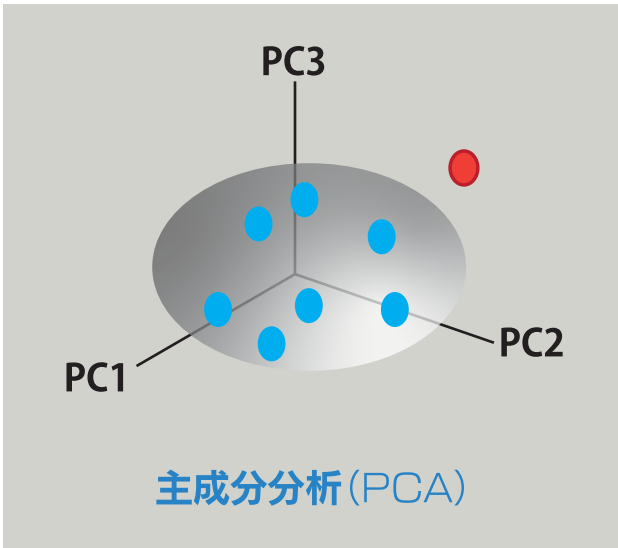
SIMCA-Library

VEKTOR DIREKTORにはデータの解析に必要な分析ツールが備わっています。

VEKTOR DIREKTORでは多変量解析等の各種の分析ツールを使用することで、モデルの作成が簡単に行え、様々な形でのデータのビジュアル化が可能です。

# データ解析機能の概要

Overview of Data Analysis Functions





# Intelligent Workflow

## 知的で直感的なワークフローがあれば 多変量データ解析問題の半分を制したことになる

"An Intelligent and Intuitive Workflow Means You Have Won  
Half The Battle With Multivariate Data Analysis Problems."

A Wise Chemometrician

## VEKTOR DIREKTORの4つのステップ

### Construction Zone

データのプロットや分析結果はVEKTOR DIREKTORのConstruction Zoneと呼ばれる領域に出力されます。Construction Zoneに表示されたデータや分析結果は互いに共有することが可能です。



### Import Data

VEKTOR DIREKTORにインポートされたデータは範囲・クラス・変数を定義した後、各種の解析を適用し、データの解釈を行います。

### Visualise Analyse Validate Interpret

VEKTOR DIREKTORは日常のルーチン分析に必要な不可欠な多変量解析のツールが備わっています。

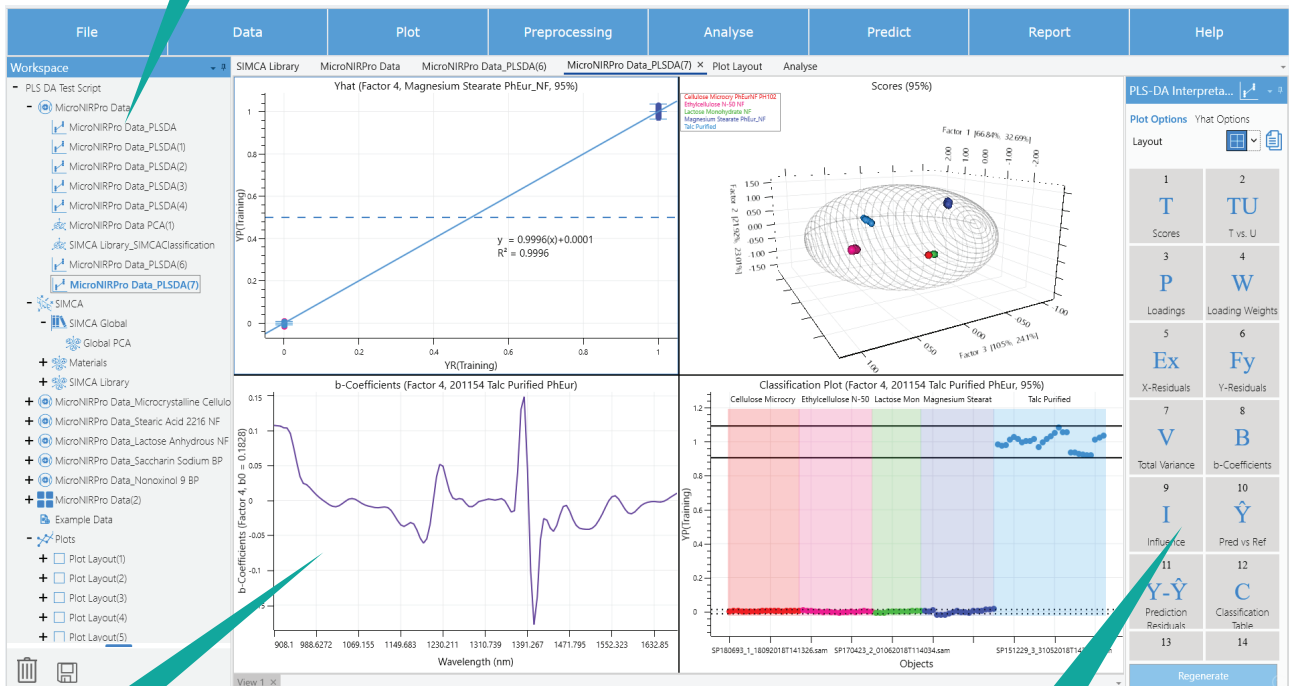


### Predict Classify Learn Improve

多変量解析で作成したモデルに新しいデータを当てはめることが可能です。

### ワークスペースナビゲーター

### 作業の流れ



双方向型スプレッドシートとグラフ表示

コンテキストメニュー 一覧



# Your Data Our Software Your Success

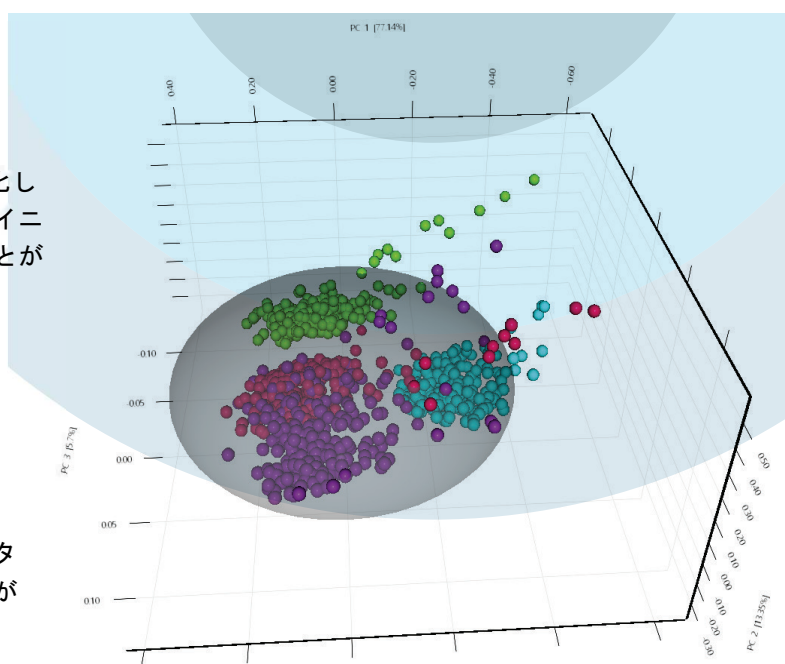
## Data Mining

### データマイニング

多変量解析によって複雑なデータをビジュアル化し、サンプルのグループ化が行えます。データのマイニングによって得られた情報から、以下のようなことが可能になります。

- ◆化学プロセスにおける最適なプロセス状態の解明
- ◆食品製造における製造条件の最適化
- ◆製剤プロセスの妥当性調査
- ◆サンプル間のグループ分け

データマイニングによってデータの示す重要なパターンを理解し、それを基にした効率的な意思決定が可能になります。



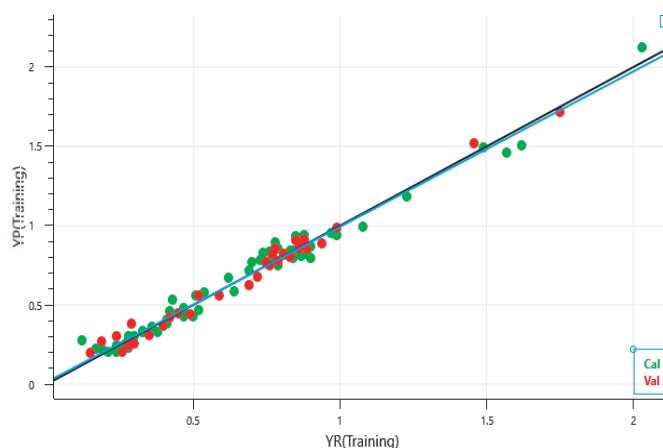
## Prediction using models

### モデルを使った予測

多変量解析モデルを用いることで品質の評価や定量的な分析がたったの数秒で行えます。この情報を使って以下のようなことが可能になります。

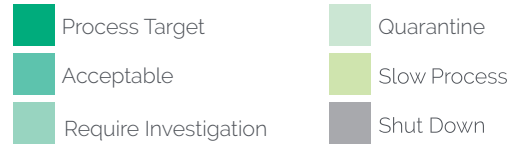
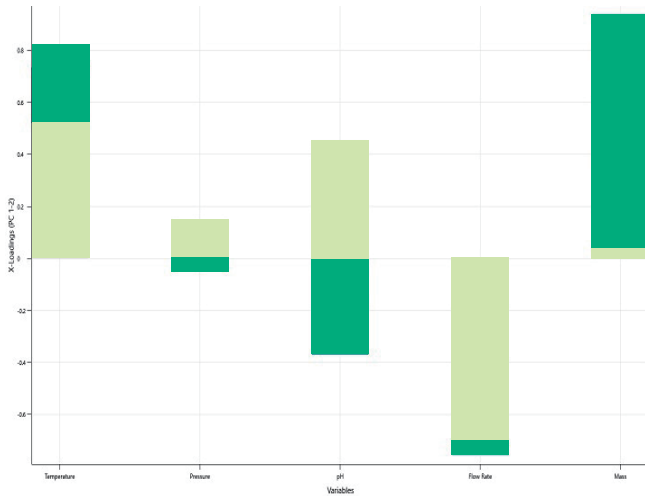
- ◆分光センサーを使って製剤プロセス中のAPI濃度を予測する
- ◆農業・食品製品中のタンパク質量や水分含有量を予測する
- ◆バイオリアクター内のエタノール成分量を決定する

分析値を使って他のプロセスのコントロールも可能です。





# Your Data Our Software Your Success



## Classification Made Easy 容易な分類

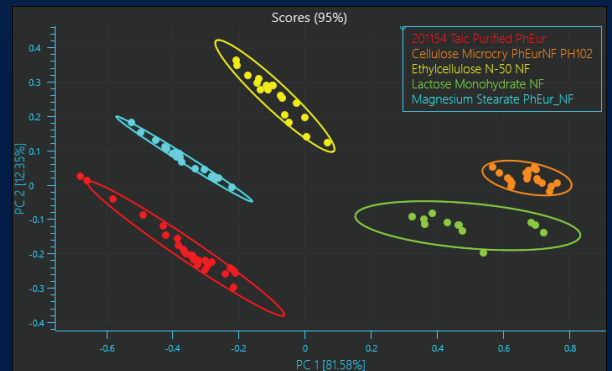
研究開発においてはデータの中に新たなクラスがあることを発見することによって、新たな薬剤の発見や既存のクラスとの判別が可能です。

産業用アプリケーションとして活用することで、例えばバイオプロセスの状態変化やプロセスの終了点の検出を行えます。

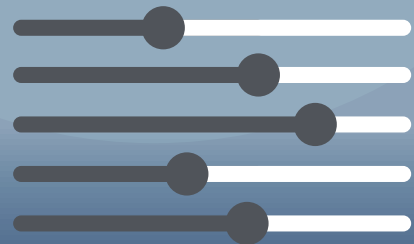
データの分類によって得られた結果はVEKTOR DIREKTORのワークスペース上で共有し最大限に有効利用することができます。

## Fine Tune Your Operation 微調整による品質向上

PCAとPLSによって得られたローディングはデータの中の説明変数がどれくらい重要なを表す指標です。この情報をもとにプロセスの現在の状態や、分析中のプロセスの状態を知ることができます。ローディングを使って出力された結果を再度微調整することが可能です。この操作によって結果を改善し、より良いプロセス・生産状態、品質特性を達成することができます。このため単なる推測に基づいたプロセス改善の取り組みから脱却が可能になります。



VEKTOR DIREKTORでは多様な形でデータの可視化が可能です。例えばこの図ではDark Theme形式でデータを表示しています。このような表示形式を任意に選んで使うことで創造的、独創的な分析を行えます。

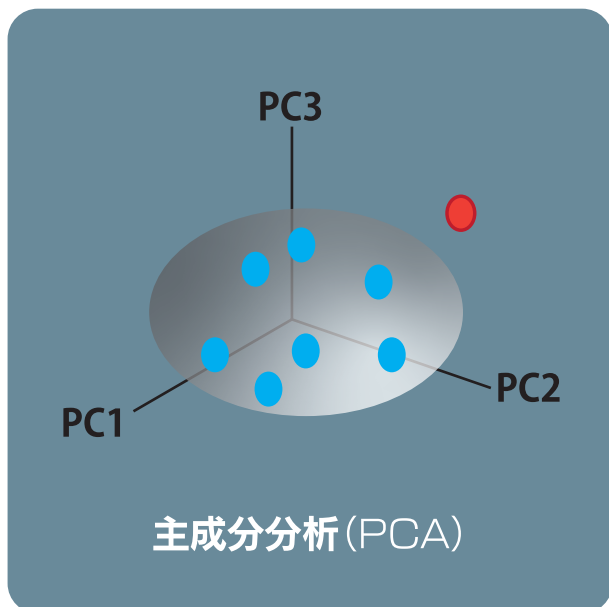




# Multivariate Analyses

**多変量解析** VEKTOR DIREKTORは、お客様が頻繁に使用する手法のみを提供することで、適切なツールを使用してデータを最大限に活用することができます。

*"By only providing the methods you use most of the time, VEKTOR DIREKTOR allows you to get the most out of your data, with the appropriate tools."*

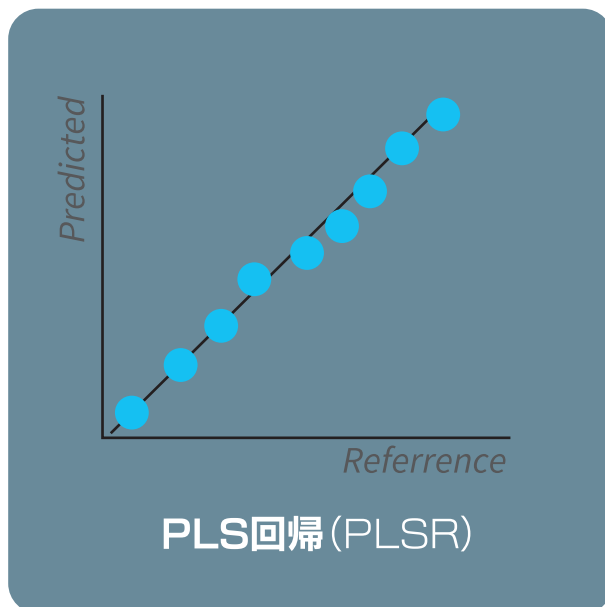


## 探索的データ解析

探索的データ解析 (EDA) はデータの多変量解析における最初の段階で用いられる分析であり、これによってデータの持つ特徴的なパターンを発見することができます。

VEKTOR DIREKTOR は主成分分析 (PCA) を使って EDA を効率的に進めることが可能です。

PCA ではデータを可視化し、結果の解釈を容易にすることができます。得られた結果はバリデーションによって信頼性の確認を行い、新たなデータセットを適用することで、適用されたデータが元のデータと同じ傾向を持つかどうかを調べることが可能です。



## 多変量回帰分析

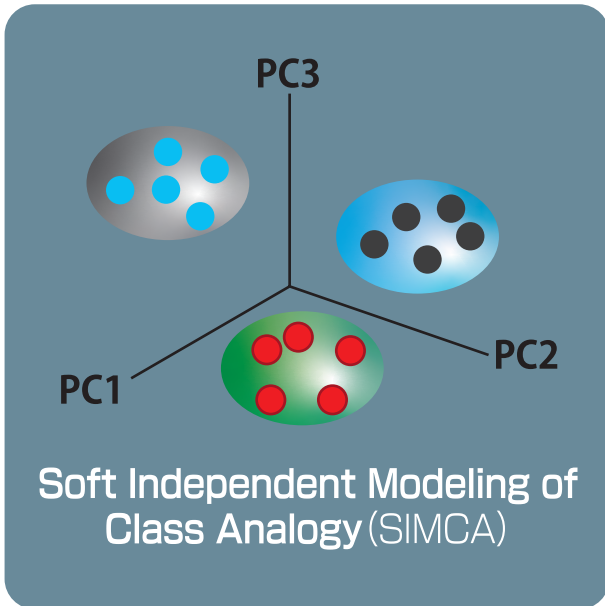
多変量回帰で作成した回帰モデルによって、スペクトルデータから製品中の構成成分の定量分析や製造プロセスの状態を分析することができます。

VEKTOR DIREKTOR は Partial Least Squares Regression (PLS 回帰) を使うことで多変量データの回帰分析を行います。PLS 回帰は以下のような特性から、多変量回帰分析においては最も一般的に用いられる方法です。

- ◆データと回帰対象との間の関係を説明する因子を探し出します。
- ◆PCAと同様に、データを効果的に可視化し、結果の解釈を容易にします。
- ◆作成したモデルはサードパーティー製品での使用も可能です。

# Multivariate Analyses

## 多変量解析



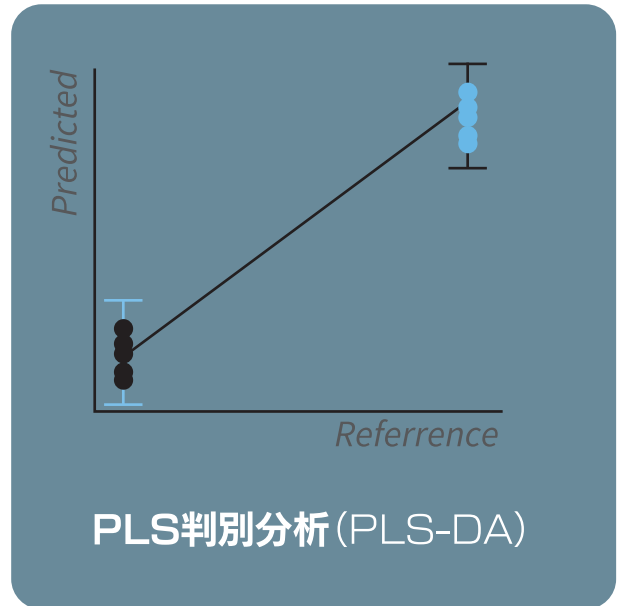
### PCAを使ったデータ分類

PCA を使うことでデータの中のサンプルをいくつかのグループに分けることができます。これは教師値無しデータ分析もしくはクラスター分析と呼ばれています。

異なるクラスごとに PCA を行い、複数個のクラスのライブラリーを作成する方法は「Soft Independent Modelling of Class Analogy (SIMCA)」と呼ばれています。

SIMCA によって得られたライブラリーは、製剤分野における近赤外スペクトルやラマンスペクトルによる原料識別等に効果的です。

SIMCA は基準となるモデルを作成しておき、新しいデータがそのモデルでどのクラスに判別されるかを調べるのに効果的です。新しいサンプルが既存のクラスの内、どれかに属するのか、もしくはどのクラスにも属さないのかを調べる事が可能です。



### PLS回帰を使った判別

PLS 判別分析は、PLS 回帰分析の拡張版と言えます。通常の PLS 回帰の原理を使ってサンプルが、どのクラスに属するのかを判定します。

VEKTOR DIREKTOR に備わっている PLS 判別分析の機能を使えば、通常の回帰分析と同様の方法で、各サンプルがどのクラスに所属するのかを調べることができます。

PLS 判別分析が出力する解析結果は効果的に可視化されており、アウトライヤーの発見やそれらの除去が効率的に行えます。

PLS 判別分析の結果はモデルとして保存し、サードパーティ製品でのクラス予測や分類に利用することができます。

この方法はデータの大まかな特徴を調べる際に便利です。VEKTOR DIREKTOR では最大で 5 つのクラスを使った PLS 判別分析を行うことができます。



# Prediktive Analytix

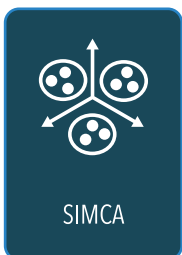
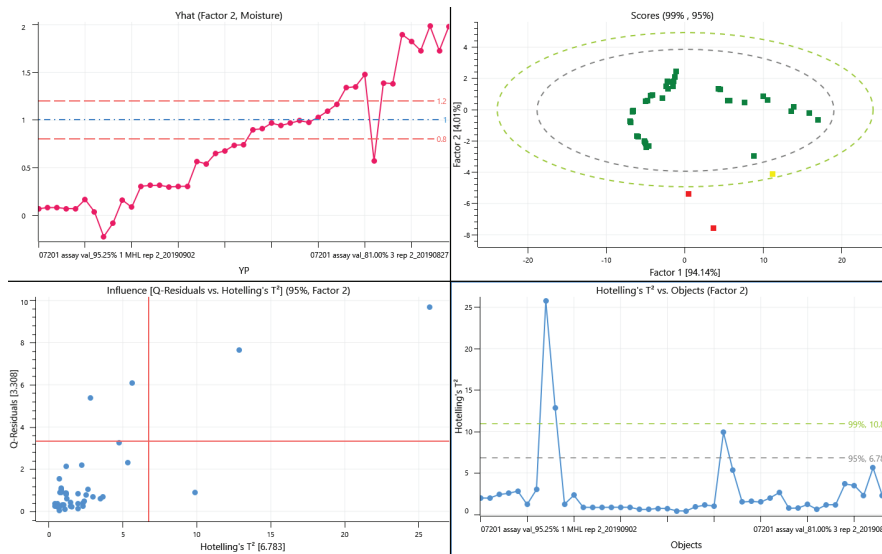
## 予測分析 使えないモデルには意味がない

"What good is a model if you can't use it?"



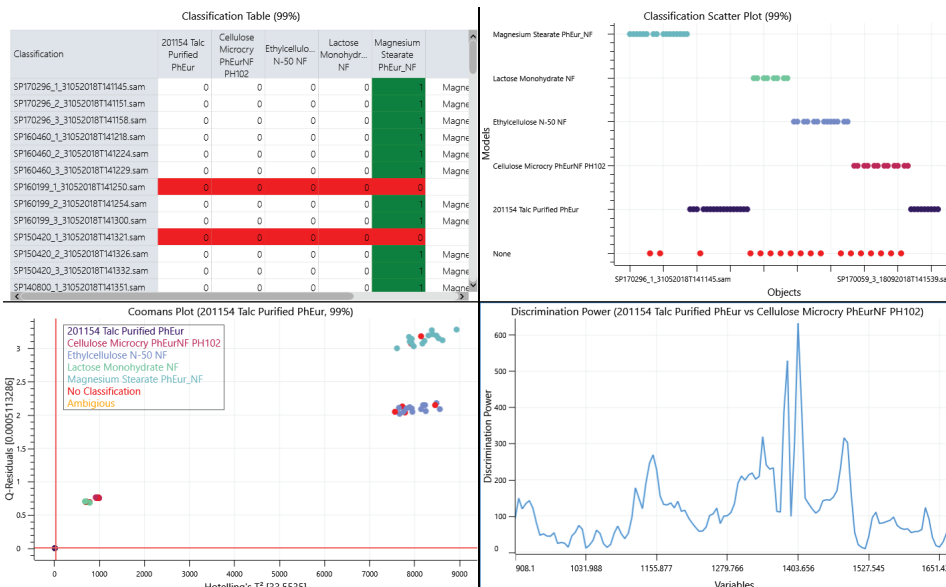
### Utilizing Analytical Models VEKTOR PREDIKTORを使った 解析モデルの活用

VEKTOR PREDIKTOR は得られたモデルを新しいデータに適用して回帰分析や分類を行うことができます。結果はモデルの種類に応じて様々な形式で表示されます。結果のプロットはスプレッドシートに効果的に表示され、レポートの作成や、さらなる解析を行うことができます。



### Create a Sorting Library. 分類ライブラリーを作成する

VEKTOR DIREKTOR で作成した分類ライブラリーは SIMCA を使って新しいデータのクラス分けに適用することができます。分析結果は分類テーブルに出力され SIMCA に備えられた各種のツールを使って詳細に調べることが可能です。原料のクラス分けや研究開発における未知の新クラスの発見などに活用できます。

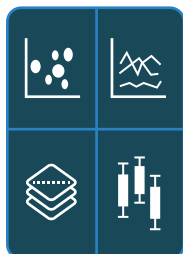




# Process Analytix in Action

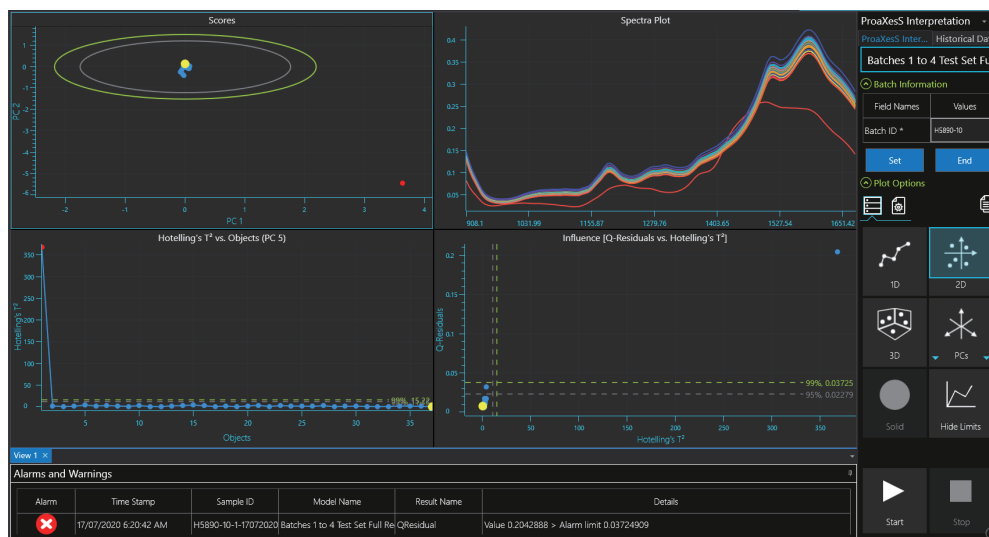
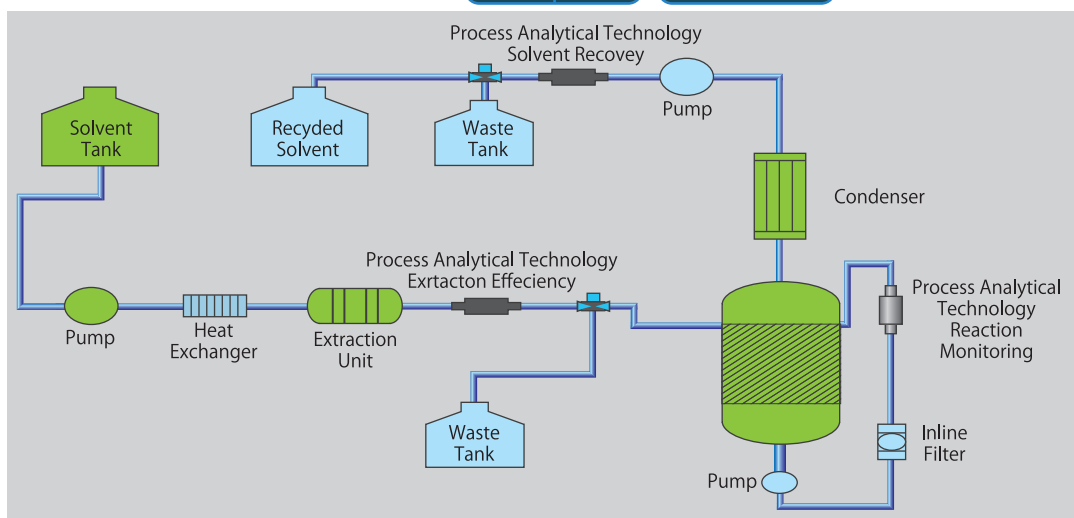
## Collect data データの収集

データは既存のデータフォーマット、テキストファイル、OPCサーバーからVEKTOR DIREKTORによって収集されビジュアル化、モデリングを行います。



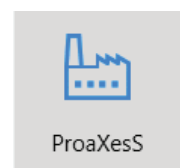
## Create the model モデルを作る

探索的解析、回帰、分類等の方法でモデルを作成・評価し、リアルタイムでの品質評価に適用します

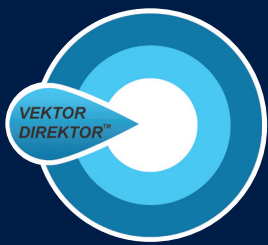


## Utilize the Model モデルを活用する

VEKTOR DIREKTORで作成したモデルはサードパーティー製のシステムでの使用や、ProaXesSアドオンを使ったプロセスの開発に利用が可能です。



**ProaXesS**  
Powered by VEKTOR DIREKTOR



Multivariate Analysis with Direction and Purpose

## 動作環境と機能・特徴

### 動作環境

- サポートOS / Windows 7, 8 & 10 (32ビット または 64ビット)
- 必要メモリー容量 (RAM) / 8GB 以上
- プロセッサー仕様 / Intel Core i7 以上 (相当が望ましい)
- ハードディスクの空き容量 / 1 GB (最小)
- グラフィックスカード / DirectX 9 もしくはそれ以降のバージョン

### インポート可能な形式

- ・ Spreadsheet, Text (.xlsx, .txt, .csv)
- ・ 各種フォーマットに対応 (GRAMS (.spc), JCAMP (.jdx), NetCDF (.cdf))
- ・ 各種の測定装置に固有のファイルに対応 (VIAVI (.sam), OPUS (.01), Brimrose (.dat), JEOL (.jdf))
- ・ Database, Control Systems (Osisoft PI, synTQ)
- ・ OPC DA, OPC UA 自動インポートが可能

### 表示機能

- ・ 折れ線グラフ
- ・ 散布図 (2D, 3D)
- ・ バブルプロット
- ・ ヒストグラム
- ・ 棒グラフ

### 前処理機能

- ・ 平滑化
- ・ ベースライン補正
- ・ ノーマライズ
- ・ Scatter Correction (Multiplicative Scatter Correction (MSC), Standard Normal Variate (SNV))
- ・ 微分

### 解析機能

- ・ 各種検定法 (分散分析, 正規性, F-検定, t-検定)
- ・ 主成分分析 (PCA)
- ・ PLS回帰 (PLSR)
- ・ Soft Independent Modelling of Class Analogy (SIMCA)
- ・ PLS判別分析 (PLS-DA)

### 主な機能の特徴

#### ◆ 簡単なデータインポート

一般的なファイル形式から特殊なフォーマットまで、様々なデータをドラッグアンドドロップで簡単にインポートが可能です。

#### ◆ 効果的なビジュアル化

多くのプロットとデータ可視化のツールを装備。プロット作成・分析はデータの解釈とそれに基づいて意思決定が可能。クラス変数を使ったグループプロットはデータの解釈とプレゼンテーション効果を高めます。

#### ◆ データ前処理を簡単に適用

多変量解析において重要な前処理機能。各種の前処理方法を組み合わせることでそれをテンプレートとして保存でき、新たなデータセットにも簡単に適用することができます。

#### ◆ 多彩な分析ツール

データの解析に必要な分析ツールを装備。VEKTOR DIREKTORでは多変量解析等の各種の分析ツールを使用することで、モデルの作成が簡単に行え、様々な形でのデータのビジュアル化が可能です。

KAX Software. © Copyright 2021 KAXG TRADING PTY LTD. All Rights Reserved.

KAX & VEKTOR DIREKTOR logs are either registered trademarks or trademarks of KAX Software in Australia and / or other countries.

KAX Group

## アカデミア | リサーチ | 産業用分析

お問合せ・デモソフトのご依頼は弊社まで



E-mail  
ask@q-dsn.co.jp



Web site  
http://www.q-dsn.co.jp



Quality  
Design

株式会社クオリティデザイン

〒612-8374 京都府京都市伏見区治部町105番地

京都市成長産業創造センター301

TEL : 075-605-3270 FAX : 075-320-3678