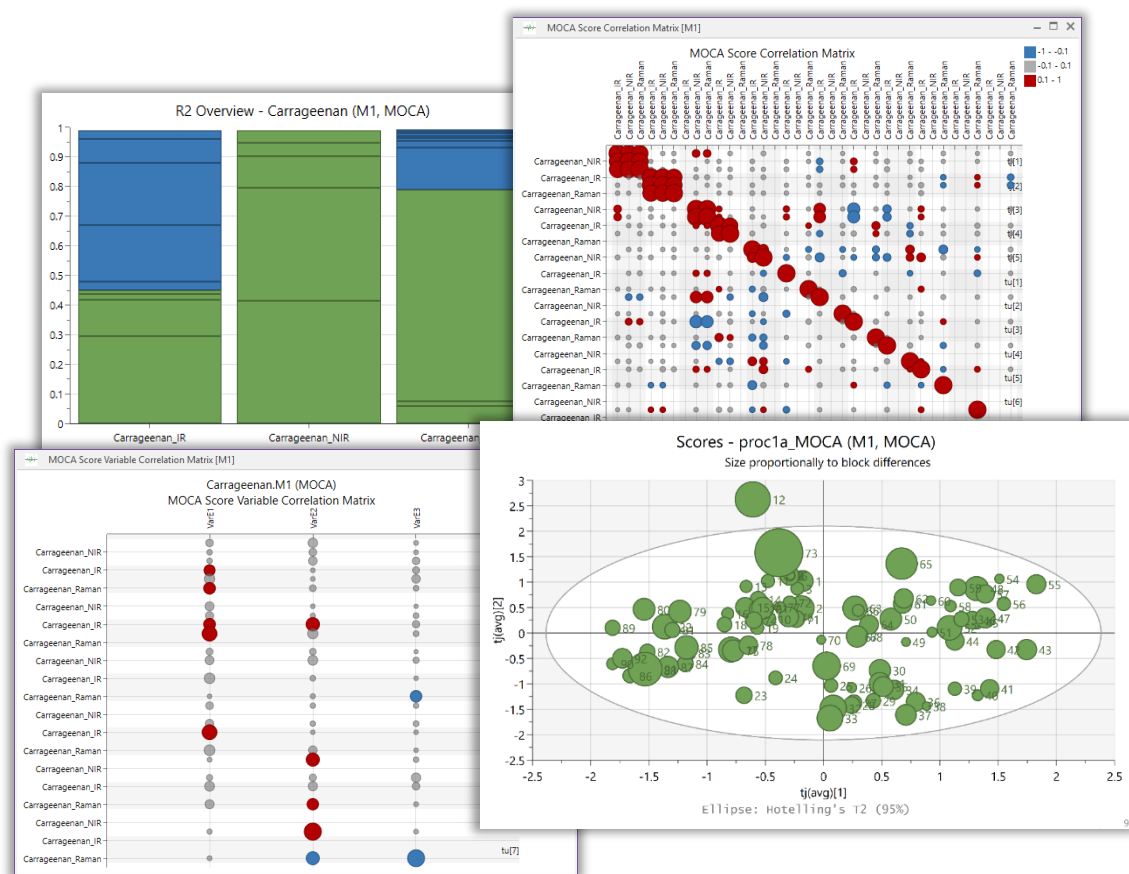


## SIMCA17 MOCA チュートリアル

### ～プロセスデータ編～





## 目次

0. はじめに .....	1
1. データセット.....	3
2. MOCA モデルを作成する .....	7
モデルの設定.....	7
モデルの計算結果の解釈 .....	11
モデルの表示.....	13
3. MOCA ツールを使用する .....	19
スコア相関行列 .....	19
スコア変数相関行列 .....	20
（参考）既知の問題 .....	25

# 0. はじめに

## MOCA とは

MOCA は **M**ultiblock **O**rthogonal **C**omponent **A**nalysis の略で、複数のデータ群（マルチブロックデータ）を解析する新しい手法です。

MOCA では、全てのブロックでサンプルが共通し、変数のみが異なるマルチブロックデータの解析が可能です。

OnPLS, JUMBA のアルゴリズムを基に、共通の変動を取り出すことで、データの概観・特徴を捉えることを可能にしています。

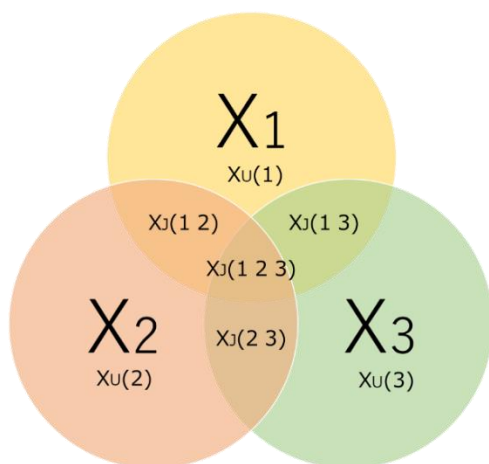
マルチブロックデータの解析例：

- ・ マルチオミクス：    メタボロミクスデータ ・ プロテオミクスデータ ・ リピドミクスデータ
- ・ 製造データ：       プロセス信号 ・ 分光法 ・ 原料組成データ
- ・ 製品評価：        官能評価 ・ 化学分析 ・ 消費者の好み

MOCA は、SIMCA15 以前の O2PLS の拡張版であり、これまでは 2 ブロックデータまでの解析が可能でしたが、MOCA では 3 ブロック以上での解析も可能となりました。

これまでの O2PLS は MOCA へ統合されました。

MOCA では各ブロック  $X_i$  について、下式のように分解します。（3 ブロックの例）



$$X_i = \underbrace{X_G}_{\text{Global Joint}} + \underbrace{X_L}_{\text{Local Joint}} + \underbrace{X_U}_{\text{Unique}} + \underbrace{E}_{\text{Residual}}$$

- ・ Globally Joint = 全ブロック共通の変動
- ・ Locally Joint = 一部共通の変動
- ・ Unique = 固有の変動
- ・ Residual = 残差

この原理に沿って、ブロックの共通変動及び固有変動を抽出し、包括的かつ信頼性の高い、マルチブロックデータ解析を可能にしています。

## データ

以下のデータを用いて、

ポリマー製造工場におけるプロセスデータのマルチブロック直交成分分析（MOCA）を行います。



- ・ サンプル：全 92 時間における、1 時間ごとのプロセス状態
- ・ 3 ブロックの各データ変数：
  - 制御プロセス 7 種類（xin 1～7）
  - 中間処理プロセス 18 種類（反応条件：x 8～15、精製ステップ：x 16～25）
  - 出力プロセス 8 種類（y 1～8）

# 1. データセット

## データセットの準備

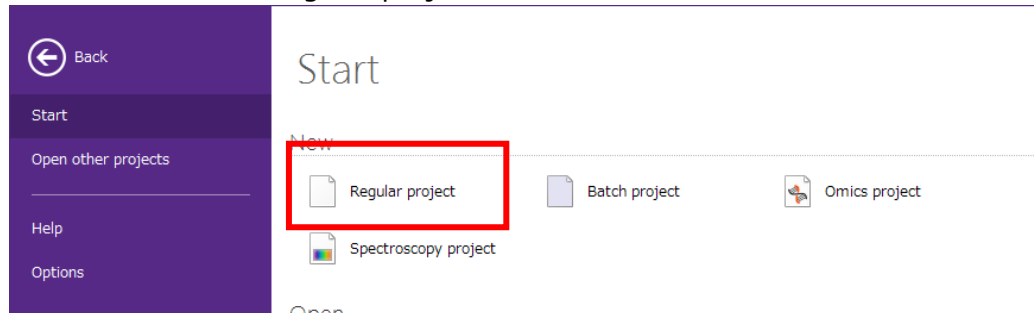
EXCEL 形式で用意します。

ファイル名：「MOCA\_proc1a.xlsx」

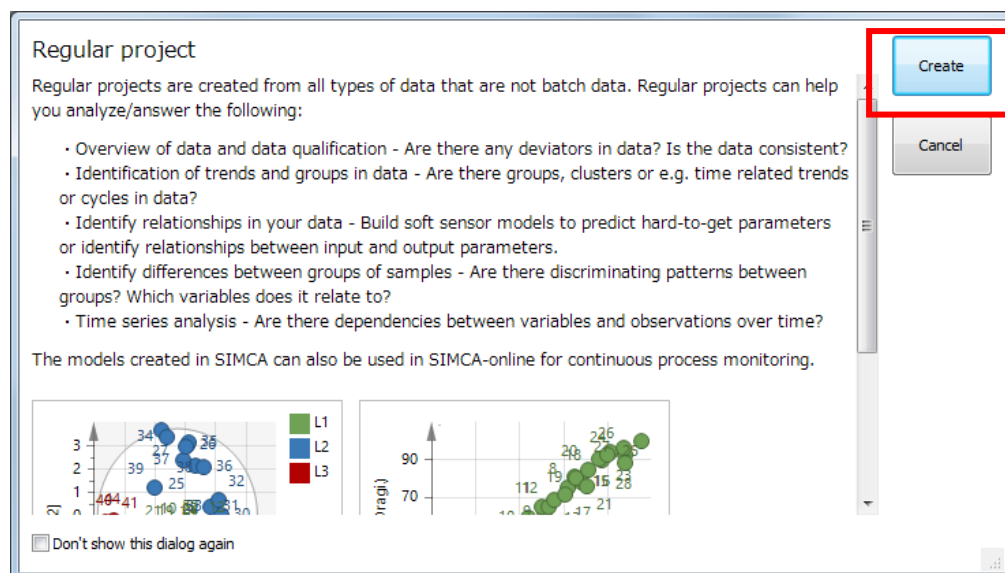
ID	Time	xin_1	xin_2	xin_3	xin_4	xin_5	xin_6	xin_7	xmd_1	xmd_2	xmd_3	xmd_4	xmd_5	xmd_6	xmd_7	xmd_8	xmd_9	xmd_10	xmd_11	xmd_12	xmd_13	xmd_14
1	Block	xin	xin	xin	xin	xin	xin	xin	xmd	xmd	xmd	xmd	xmd	xmd	xmd	xmd	xmd	xmd	xmd	xmd	xmd	xmd
3	t1	1	0.47	-1.66	-0.19	1.94	0.07	-4.54	-0.09	0.7	-0.31	0.78	-0.1	0.27	-0.16	-1.02	0.29	-0.13	-0.12	0.24	0.22	-0.01
4	t2	2	0.05	-0.83	0.04	0.75	0.25	-0.02	-0.6	0.75	-0.32	0.61	-0.32	0.3	-0.03	-0.53	0.18	-0.17	-0.11	0.22	0.05	-0.08
5	t3	3	-0.58	-0.21	-0.08	0.89	0.34	0.12	-0.86	0.77	0.44	0.58	-0.15	0.19	-0.21	-0.24	0.14	0.07	-0.17	0.2	-0.02	-0.13
6	t4	4	-0.9	0.11	0.16	1.43	0.45	0.13	-0.41	0.11	0.9	0.78	-0.2	0.41	-0.16	-0.11	0.13	0.17	-0.01	0.29	0.07	0.01
7	t5	5	-0.78	-0.33	-0.34	1.51	0.5	-0.01	-0.31	0.79	1.13	0.79	-0.3	1.16	0.12	0.03	0.08	0.14	-0.05	0.26	0.06	-0.04
8	t6	6	-0.87	-0.86	-0.6	0.5	0.49	0.03	-0.36	0.57	0.88	0.39	-0.29	0.12	0.02	-0.07	0.03	0.11	-0.18	0.21	0.05	-0.13
9	t7	7	-0.49	0.48	-0.28	0.55	0.3	-0.1	-0.41	0.53	1.2	0.3	-0.31	0.11	-0.14	-0.27	0.12	0.17	-0.16	0.22	-0.01	-0.1
10	t8	8	-0.39	1.1	0.2	-0.31	0.28	-0.1	-0.09	0.33	1.56	0.11	-0.28	0.1	-0.09	-0.31	0.21	0.14	-0.17	0.21	0.09	-0.08
11	t9	9	-0.06	0.95	0.24	-1.08	0.25	0.12	0.11	-0.12	1.1	0.44	-0.07	-0.13	-0.06	-0.15	0.31	0.4	0.15	0.4	0.39	0.23
12	t10	10	0.27	0.11	-0.86	-0.87	0.15	0.19	-0.06	-0.03	1.09	0.5	-0.26	0.39	0.34	-0.09	0.07	0.36	0.12	-5.19	0.14	0.14
13	t11	11	0.2	0.52	-0.77	-1.08	0.08	0.3	0.08	-0.11	1.18	0.6	-0.02	0.19	0.27	-0.46	0.29	0.29	-0.25	0.16	-0.11	-0.15
14	t12	12	0.1	0.62	-4.38	-0.88	-0.07	0.21	0.14	-0.11	0.87	0.63	0.11	0.05	-0.19	-0.74	0.29	-0.09	-0.22	0.16	-0.15	-0.15
15	t13	13	-0.38	0.81	-0.27	-1.22	-0.04	0.2	0.05	-1.08	-0.03	0.44	-0.01	0.11	-0.37	-0.84	0.24	-0.06	-0.25	0.14	-0.34	-0.2
16	t14	14	-0.01	0.72	0.2	-1.04	-0.01	0.3	0.14	-1	-0.16	0.07	-0.01	0.37	-0.48	-0.6	0.26	-0.06	-0.32	0.1	-0.36	-0.26
17	t15	15	-0.62	0.19	-0.06	-0.94	-0.13	0.23	0.01	-1.01	-0.22	0.07	0.07	0.34	-0.6	-0.65	0.26	0	-0.29	0.13	-0.33	-0.21
18	t16	16	-0.78	0.25	-0.16	-0.72	0.01	0.3	0.1	-1	-0.18	0.09	0.07	-0.33	-0.4	-0.8	0.25	-0.23	-0.28	0.12	-0.4	-0.24
19	t17	17	-0.65	-1.86	-1.48	-0.72	0	0.21	0.35	-1.04	-0.69	0.06	0.24	-0.61	-0.36	-0.72	0.36	-0.2	-0.1	0.18	-0.2	-0.11
20	t18	18	-1.14	0.04	0.34	-0.26	0.15	0.21	0.3	-1.02	-0.59	0.15	0.21	-0.68	-0.07	-0.74	0.31	-0.32	0.04	0.25	-0.21	-0.03
21	t19	19	-0.59	0.17	0.66	0.57	0.23	0.24	-0.12	-1.36	-0.94	-0.02	0.23	-1.05	0.09	-0.84	0.34	-0.26	0.12	0.29	-0.2	0.05
22	t20	20	-0.59	0.63	0.17	0.57	0.23	0.31	0.44	-1.35	-1.15	-0.11	0.17	-1.38	0.17	-0.86	0.31	-0.17	-0.07	0.12	-0.53	-0.22
23	t21	21	-1.04	0.43	0.1	1.38	0.28	0.26	0.38	-1.4	-1.09	-0.16	0.32	-1.38	-0.13	-0.91	0.42	-0.05	0.02	0.24	-0.24	-0.01
24	t22	22	-2.66	0.41	0.09	0.66	-0.72	0.18	-0.4	-1.39	-0.94	-0.13	0.3	-0.74	0.15	-0.78	0.4	-0.23	0.28	0.39	0	0.21
25	t23	23	-0.69	-3.41	-2.19	-0.16	-0.49	0.14	-2.86	0.08	-0.82	-0.01	0.86	-1.36	0.64	-0.97	-0.11	0.13	0.17	0.25	0.33	0.13
26	t24	24	-0.46	-3.12	-2.45	0.25	0.19	-0.65	-1.25	0.09	-0.67	-0.16	0.8	-1.58	0.19	-0.8	-0.13	0.03	-0.12	0.09	0.05	-0.11

## データセットのインポート

SIMCA 17 を起動し、Regular project をクリックします。

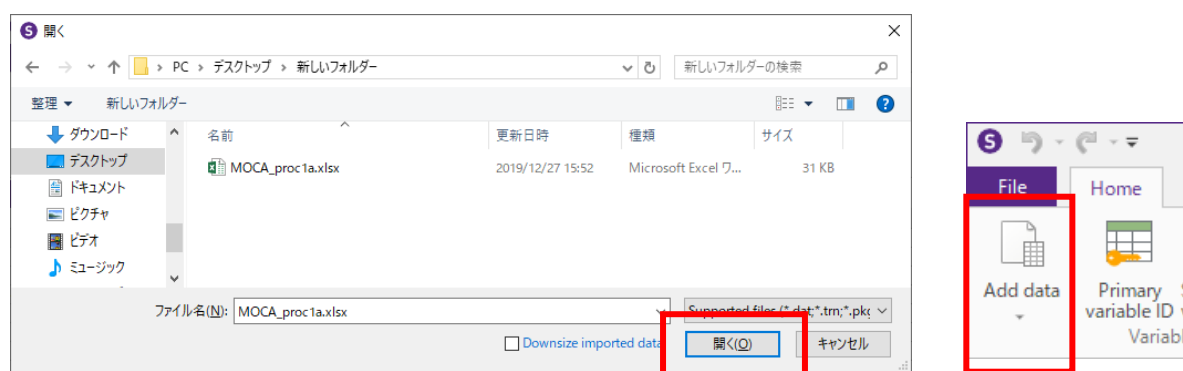


Create をクリックします。



用意していたデータセットを指定して、開きます。

(このダイアログが開かない場合は、Home > Add data をクリックします。)



SIMCA が自動で ID を設定します。

ユーザー側で指定する場合には設定を変更する必要があります。

Primary ID	Secondary ID	Block	Time	xin_1	xin_2	xin_3	xin_4	xin_5	xin_6	xin_7	xmd_1	xmd_2	xmd_3	xmd_4	xmd_5	xmd_6	xmd_7
3	t1	1	1	0.47	-1.66	-0.19	1.94	0.07	-4.54	-0.09	0.7	-0.31	0.78	-0.1	0.27	-0.16	-1.02
4	t2	2	2	0.05	-0.83	0.04	0.75	0.25	-0.02	-0.6	0.75	-0.32	0.61	-0.32	0.3	-0.03	-0.53
5	t3	3	3	-0.58	-0.21	-0.08	0.89	0.34	0.12	-0.86	0.77	0.44	0.58	-0.15	0.19	-0.21	-0.24
6	t4	4	4	-0.9	0.11	0.16	1.43	0.45	0.13	-0.41	0.11	0.9	0.78	-0.2	0.41	-0.16	-0.11
7	t5	5	5	-0.78	-0.33	-0.34	1.51	0.5	-0.01	-0.31	0.79	1.13	0.79	-0.3	1.16	0.12	0.03
8	t6	6	6	-0.87	-0.86	-0.6	0.5	0.49	0.03	-0.36	0.57	0.88	0.39	-0.29	0.12	0.02	-0.07
9	t7	7	7	-0.49	0.48	-0.28	0.55	0.3	-0.1	-0.41	0.53	1.2	0.3	-0.31	0.11	-0.14	-0.27
10	t8	8	8	-0.39	1.1	0.2	-0.31	0.28	-0.1	-0.09	0.33	1.56	0.11	-0.28	0.1	-0.09	-0.31
11	t9	9	9	-0.06	0.95	0.24	-1.08	0.25	0.12	0.11	-0.12	1.1	0.44	-0.07	-0.13	-0.06	-0.15
12	t10	10	10	0.27	0.11	-0.86	-0.87	0.15	0.19	-0.06	-0.03	1.09	0.5	-0.26	0.39	0.34	-0.09
13	t11	11	11	0.2	0.52	-0.77	-1.08	0.08	0.3	0.08	-0.11	1.18	0.6	-0.02	0.19	0.27	-0.46
14	t12	12	12	0.1	0.62	-4.38	-0.88	-0.07	0.21	0.14	-0.11	0.87	0.63	0.11	0.05	-0.19	-0.74
15	t13	13	13	-0.38	0.81	-0.27	-1.22	-0.04	0.2	0.05	-1.08	-0.03	0.44	-0.01	0.11	-0.37	-0.84
16	t14	14	14	-0.01	0.72	0.2	-1.04	-0.01	0.3	0.14	-1	-0.16	0.07	-0.01	0.37	-0.48	-0.6
17	t15	15	15	-0.62	0.19	-0.06	-0.94	-0.13	0.23	0.01	-1.01	-0.22	0.07	0.07	0.34	-0.6	-0.65
18	t16	16	16	-0.78	0.25	-0.16	-0.72	0.01	0.3	0.1	-1	-0.18	0.09	0.07	-0.33	-0.4	-0.8
19	t17	17	17	-0.65	-1.86	-1.48	-0.72	0	0.21	0.35	-1.04	-0.69	0.06	0.24	-0.61	-0.36	-0.72
20	t18	18	18	-1.14	0.04	0.34	-0.26	0.15	0.21	0.3	-1.02	-0.59	0.15	0.21	-0.68	-0.07	-0.74
21	t19	19	19	-0.59	0.17	0.66	0.57	0.23	0.24	-0.12	-1.36	-0.94	-0.02	0.23	-1.05	0.09	-0.84
22	t20	20	20	-0.59	0.63	0.17	0.57	0.23	0.31	0.44	-1.35	-1.15	-0.11	0.17	-1.38	0.17	-0.86
23	t21	21	21	-1.04	0.43	0.1	1.38	0.28	0.26	0.38	-1.4	-1.09	-0.16	0.32	-1.38	-0.13	-0.91
24	t22	22	22	-2.66	0.41	0.09	0.66	-0.72	0.18	-0.4	-1.39	-0.94	-0.13	0.3	-0.74	0.15	-0.78
25	t23	23	23	-0.69	-3.41	-2.19	-0.16	-0.49	0.14	-2.86	0.08	-0.82	-0.01	0.86	-1.36	0.64	-0.97

Time を X-variables に変更し、“Finish import” をクリックします。

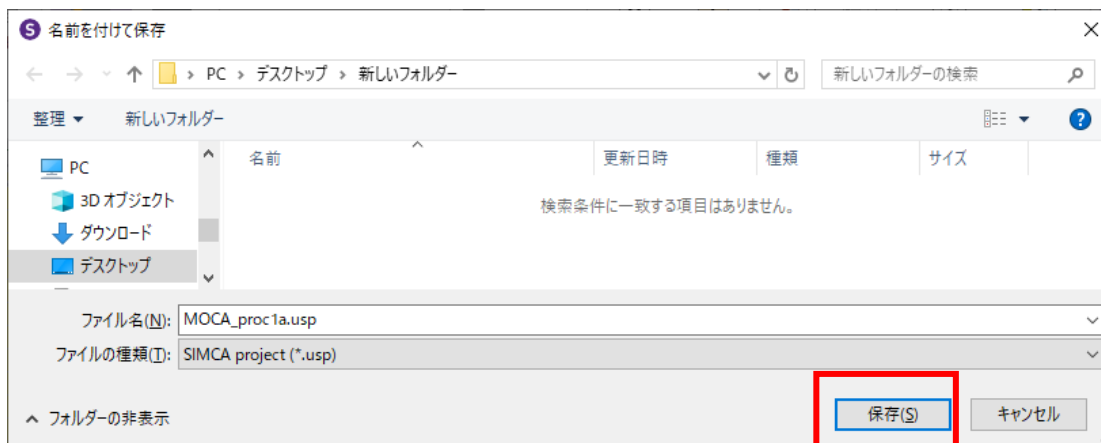
Primary ID	Secondary ID	Block	Time	xin_1	xin_2	xin_3	xin_4	xin_5	xin_6	xin_7	xmd_1	xmd_2	xmd_3	xmd_4	xmd_5	xmd_6	xmd_7
3	t1	1	1	0.47	-1.66	-0.19	1.94	0.07	-4.54	-0.09	0.7	-0.31	0.78	-0.1	0.27	-0.16	-1.02
4	t2	2	2	0.05	-0.83	0.04	0.75	0.25	-0.02	-0.6	0.75	-0.32	0.61	-0.32	0.3	-0.03	-0.53
5	t3	3	3	-0.58	-0.21	-0.08	0.89	0.34	0.12	-0.86	0.77	0.44	0.58	-0.15	0.19	-0.21	-0.24
6	t4	4	4	-0.9	0.11	0.16	1.43	0.45	0.13	-0.41	0.11	0.9	0.78	-0.2	0.41	-0.16	-0.11
7	t5	5	5	-0.78	-0.33	-0.34	1.51	0.5	-0.01	-0.31	0.79	1.13	0.79	-0.3	1.16	0.12	0.03
8	t6	6	6	-0.87	-0.86	-0.6	0.5	0.49	0.03	-0.36	0.57	0.88	0.39	-0.29	0.12	0.02	-0.07
9	t7	7	7	-0.49	0.48	-0.28	0.55	0.3	-0.1	-0.41	0.53	1.2	0.3	-0.31	0.11	-0.14	-0.27
10	t8	8	8	-0.39	1.1	0.2	-0.31	0.28	-0.1	-0.09	0.33	1.56	0.11	-0.28	0.1	-0.09	-0.31
11	t9	9	9	-0.06	0.95	0.24	-1.08	0.25	0.12	0.11	-0.12	1.1	0.44	-0.07	-0.13	-0.06	-0.15
12	t10	10	10	0.27	0.11	-0.86	-0.87	0.15	0.19	-0.06	-0.03	1.09	0.5	-0.26	0.39	0.34	-0.09
13	t11	11	11	0.2	0.52	-0.77	-1.08	0.08	0.3	0.08	-0.11	1.18	0.6	-0.02	0.19	0.27	-0.46
14	t12	12	12	0.1	0.62	-4.38	-0.88	-0.07	0.21	0.14	-0.11	0.87	0.63	0.11	0.05	-0.19	-0.74
15	t13	13	13	-0.38	0.81	-0.27	-1.22	-0.04	0.2	0.05	-1.08	-0.03	0.44	-0.01	0.11	-0.37	-0.84
16	t14	14	14	-0.01	0.72	0.2	-1.04	-0.01	0.3	0.14	-1	-0.16	0.07	-0.01	0.37	-0.48	-0.6
17	t15	15	15	-0.62	0.19	-0.06	-0.94	-0.13	0.23	0.01	-1.01	-0.22	0.07	0.07	0.34	-0.6	-0.65
18	t16	16	16	-0.78	0.25	-0.16	-0.72	0.01	0.3	0.1	-1	-0.18	0.09	0.07	-0.33	-0.4	-0.8
19	t17	17	17	-0.65	-1.86	-1.48	-0.72	0	0.21	0.35	-1.04	-0.69	0.06	0.24	-0.61	-0.36	-0.72
20	t18	18	18	-1.14	0.04	0.34	-0.26	0.15	0.21	0.3	-1.02	-0.59	0.15	0.21	-0.68	-0.07	-0.74
21	t19	19	19	-0.59	0.17	0.66	0.57	0.23	0.24	-0.12	-1.36	-0.94	-0.02	0.23	-1.05	0.09	-0.84
22	t20	20	20	-0.59	0.63	0.17	0.57	0.23	0.31	0.44	-1.35	-1.15	-0.11	0.17	-1.38	0.17	-0.86
23	t21	21	21	-1.04	0.43	0.1	1.38	0.28	0.26	0.38	-1.4	-1.09	-0.16	0.32	-1.38	-0.13	-0.91
24	t22	22	22	-2.66	0.41	0.09	0.66	-0.72	0.18	-0.4	-1.39	-0.94	-0.13	0.3	-0.74	0.15	-0.78
25	t23	23	23	-0.69	-3.41	-2.19	-0.16	-0.49	0.14	-2.86	0.08	-0.82	-0.01	0.86	-1.36	0.64	-0.97

※設定時、Class ID は使用しないでください。

モデル作成時に、Block の設定ができなくなります。（詳細は P.25～）



保存先を指定して、インポートを終了します。



取り込まれたデータセットが表示されます。

Dataset - process

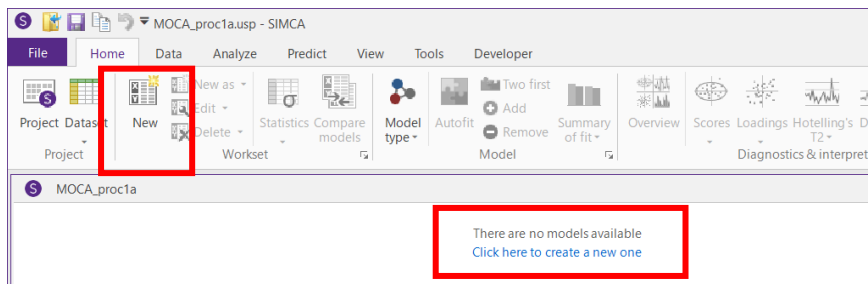
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
1 Primary ID	Time	xin_1	xin_2	xin_3	xin_4	xin_5	xin_6	xin_7	xmd_1	xmd_2	xmd_3	xmd_4	xmd_5	xmd_6
2 Block	xin	xin	xin	xin	xin	xin	xin	xin	xmd	xmd	xmd	xmd	xmd	xmd
3 t1	1	0.47	-1.66	-0.19	1.94	0.07	-4.54	-0.09	0.7	-0.31	0.78	-0.1	0.27	-0.1
4 t2	2	0.05	-0.83	0.04	0.75	0.25	-0.02	-0.6	0.75	-0.32	0.61	-0.32	0.3	-0.1
5 t3	3	-0.58	-0.21	-0.08	0.89	0.34	0.12	-0.86	0.77	0.44	0.58	-0.15	0.19	-0.2
6 t4	4	-0.9	0.11	0.16	1.43	0.45	0.13	-0.41	0.11	0.9	0.78	-0.2	0.41	-0.1
7 t5	5	-0.78	-0.33	-0.34	1.51	0.5	-0.01	-0.31	0.79	1.13	0.79	-0.3	1.16	0.1
8 t6	6	-0.87	-0.86	-0.6	0.5	0.49	0.03	-0.36	0.57	0.88	0.39	-0.29	0.12	0.0
9 t7	7	-0.49	0.48	-0.28	0.55	0.3	-0.1	-0.41	0.53	1.2	0.3	-0.31	0.11	-0.1
10 t8	8	-0.39	1.1	0.2	-0.31	0.28	-0.1	-0.09	0.33	1.56	0.11	-0.28	0.1	-0.1
11 t9	9	-0.06	0.95	0.24	-1.08	0.25	0.12	0.11	-0.12	1.1	0.44	-0.07	-0.13	-0.1
12 t10	10	0.27	0.11	-0.86	-0.87	0.15	0.19	-0.06	-0.03	1.09	0.5	-0.26	0.39	0.2
13 t11	11	0.2	0.52	-0.77	-1.08	0.08	0.3	0.08	-0.11	1.18	0.6	-0.02	0.19	0.2
14 t12	12	0.1	0.62	-4.38	-0.88	-0.07	0.21	0.14	-0.11	0.87	0.63	0.11	0.05	-0.1
15 t13	13	-0.38	0.81	-0.27	-1.22	-0.04	0.2	0.05	-1.08	-0.03	0.44	-0.01	0.11	-0.2
16 t14	14	-0.01	0.72	0.2	-1.04	-0.01	0.3	0.14	-1	-0.16	0.07	-0.01	0.37	-0.4
17 t15	15	-0.62	0.19	-0.06	-0.94	-0.13	0.23	0.01	-1.01	-0.22	0.07	0.07	0.34	-0
18 t16	16	-0.78	0.25	-0.16	-0.72	0.01	0.3	0.1	-1	-0.18	0.09	0.07	-0.33	-0
19 t17	17	-0.65	-1.86	-1.48	-0.72	0	0.21	0.35	-1.04	-0.69	0.06	0.24	-0.61	-0.3
20 t18	18	-1.14	0.04	0.34	-0.26	0.15	0.21	0.3	-1.02	-0.59	0.15	0.21	-0.68	-0.1
21 t19	19	-0.59	0.17	0.66	0.57	0.23	0.24	-0.12	-1.36	-0.94	-0.02	0.23	-1.05	0.1
22 t20	20	-0.59	0.63	0.17	0.57	0.23	0.31	0.44	-1.35	-1.15	-0.11	0.17	-1.38	0.1

以上で、データセットの完了です。

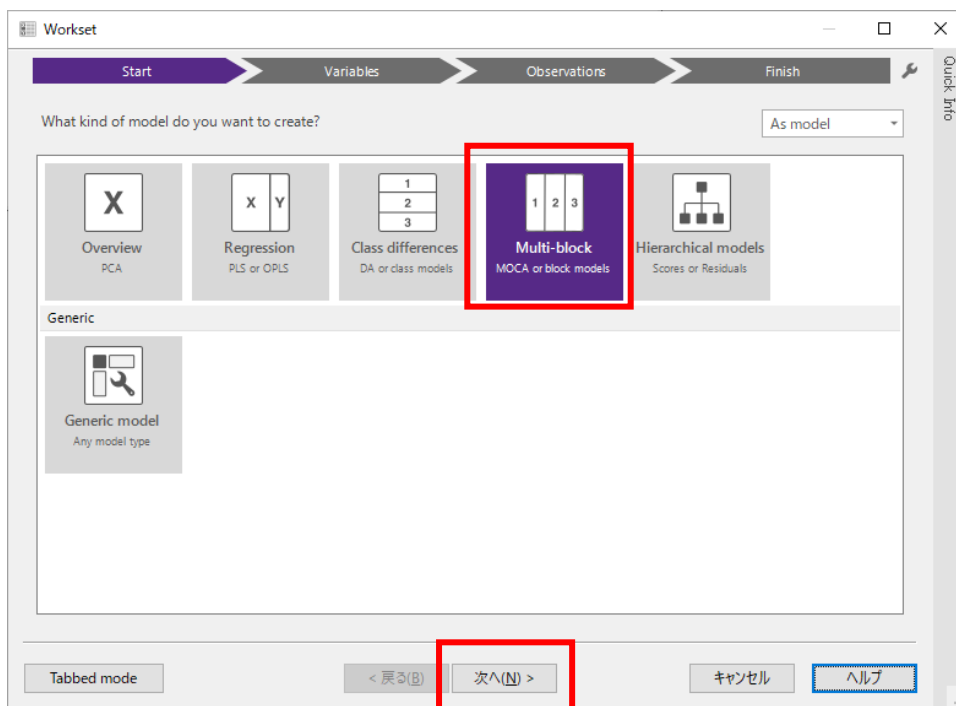
## 2. MOCA モデルを作成する

### モデルの設定

Home > New または “Click here to create a new one” をクリックします。

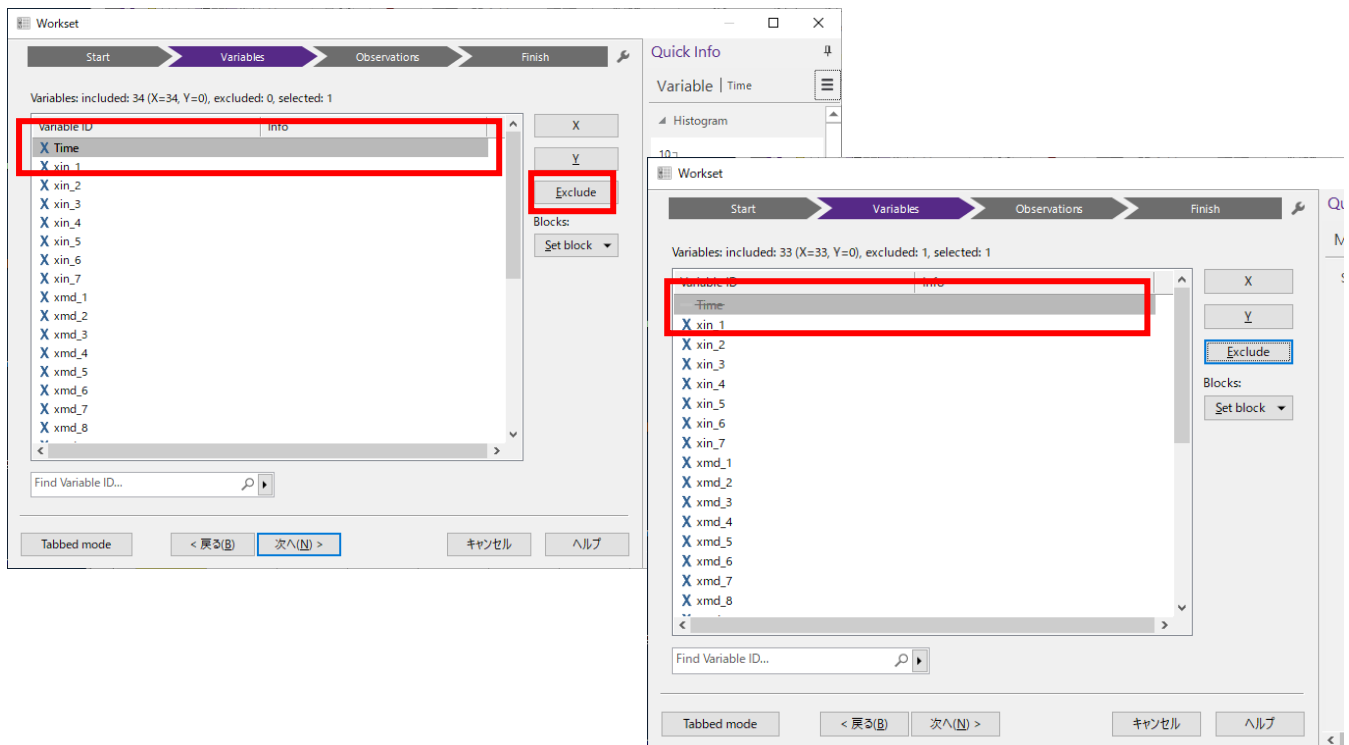


Multi-block を選択し、次へをクリックします。

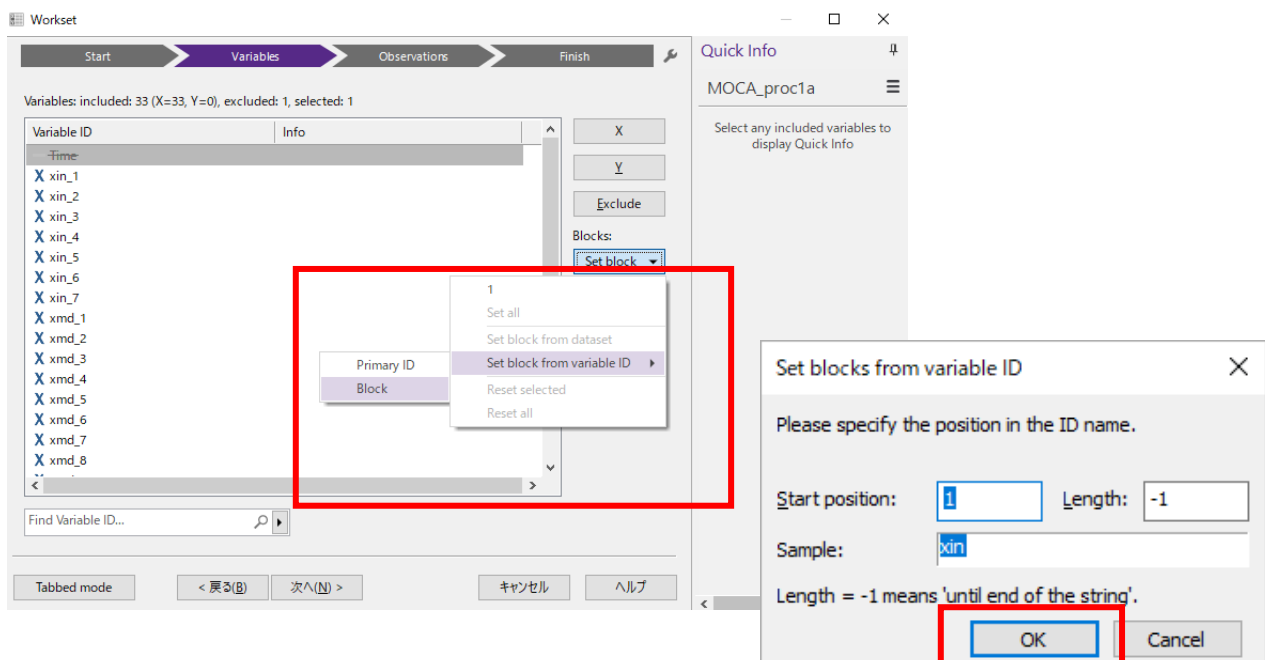


Variables（変数）の設定をします。変数はデフォルトのように、全て X で設定します。

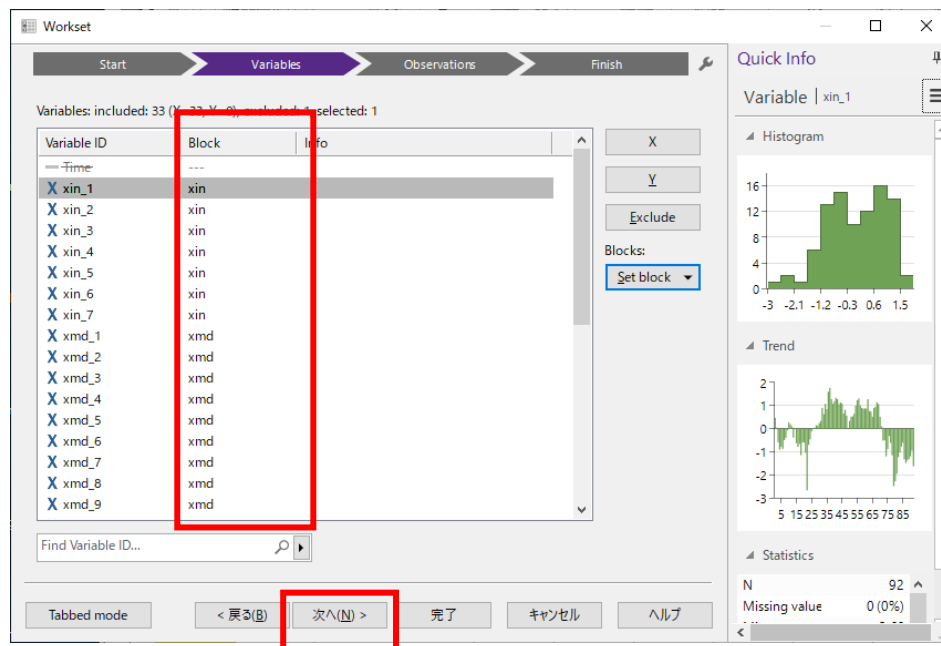
“Time” はモデルの作成には使用しないので、Exclude します。



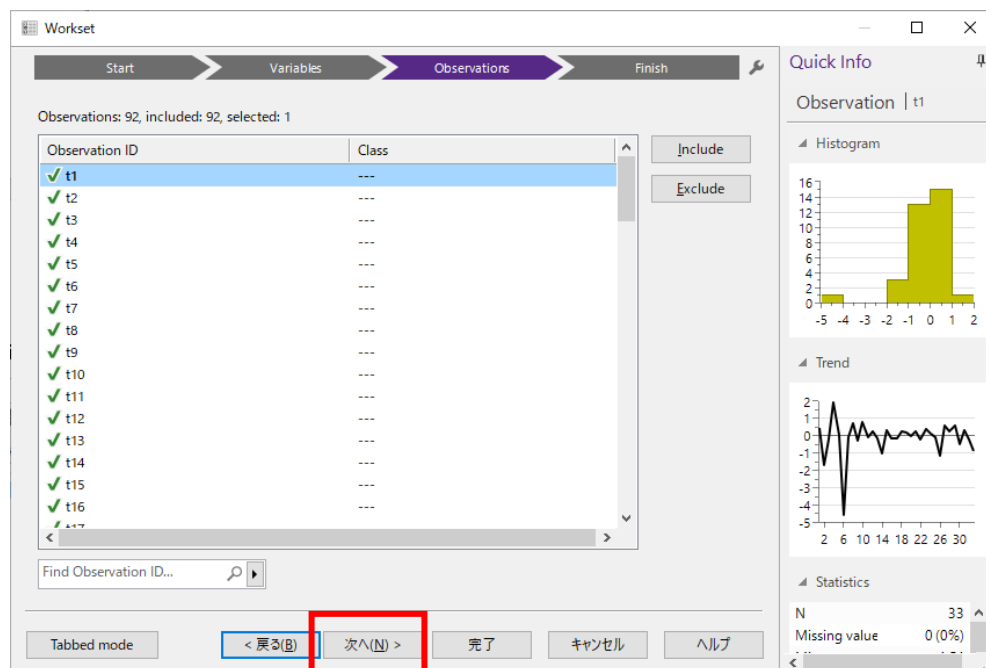
Set block > Set block from variable ID から Block を選択し、OK をクリックします。



Block が設定されたことを確認し、次へをクリックします。

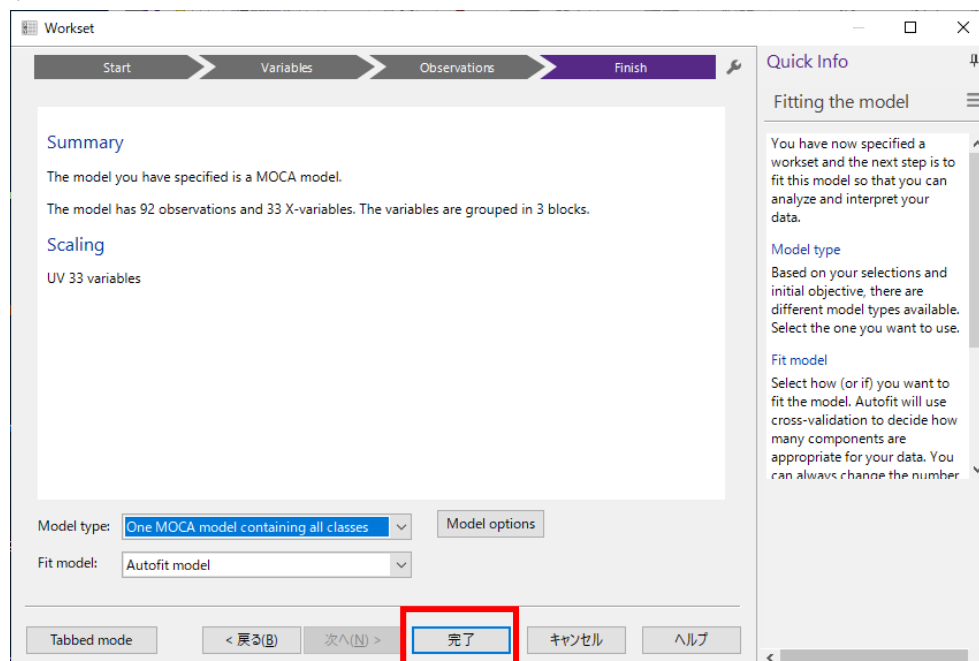


Observations (サンプル) の設定をします。ここでは特に設定の必要はありません。次へをクリックします。



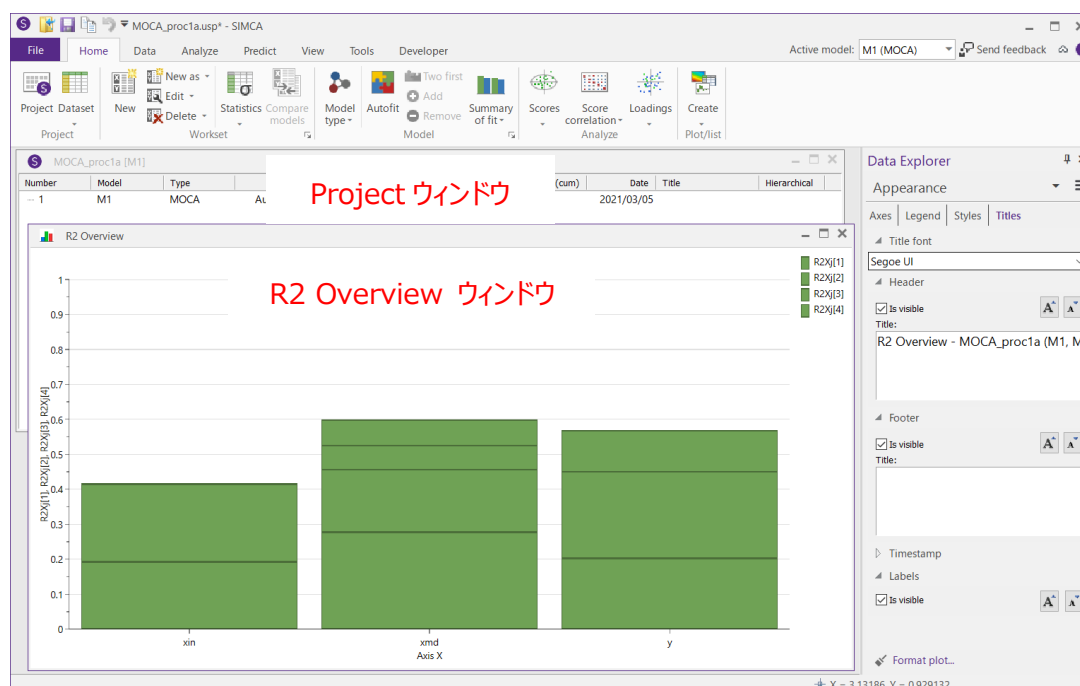
Summary 画面ではモデルタイプ、変数（variables）、サンプル（observations）、ブロック数およびスケーリング（scaling）が表示されます。MOCA ではデフォルトとして、UV スケーリングの使用が推奨されています。

Model type が “One MOCA model containing all classes” に設定されていることを確認し、完了をクリックします。



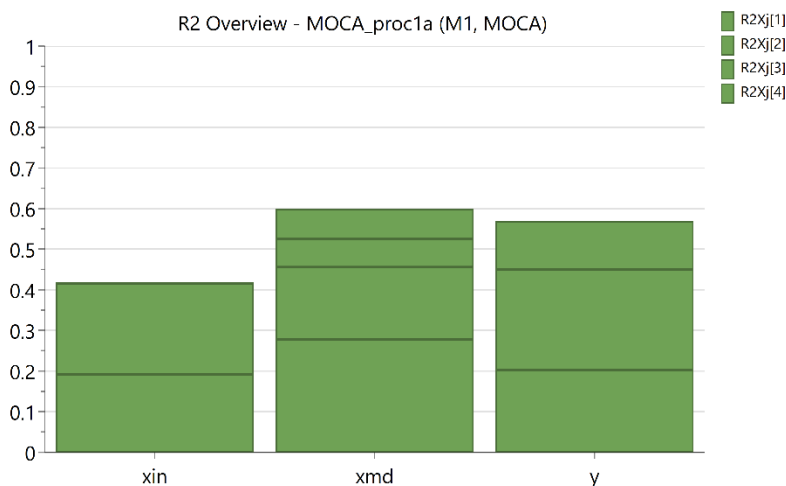
SIMCA が自動的に最適なモデルを計算し、モデルを作成します。

MOCA では Summary of Fit の代わりに、R2 Overview(寄与率)ウィンドウが表示されます。



## モデルの計算結果の解釈

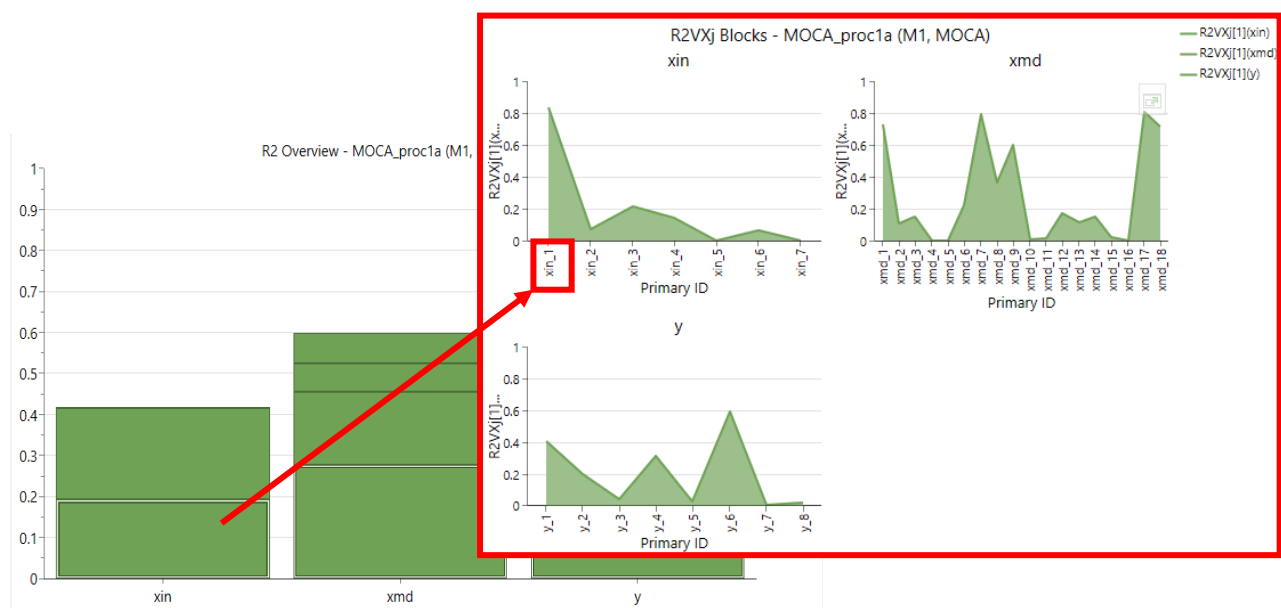
R2 Overview ウィンドウでは、横軸は各ブロックを、縦軸は R2（寄与率）を示し、Joint（緑色）と Unique（青色）が色別で表されます。ここでは青色はなく、緑色だけなので、3つのブロックに対し全て Joint で構成されたモデルが作成されたことがわかります。



また、各ブロックのバー内に見える段数は、抽出された成分の数を表します。

任意の成分をダブルクリックすると、その成分における変数ごとの R2 の値を見ることができます。

例えば、一番下段の R2X[1]をダブルクリックすると、xin ブロックでは xin\_1 が特にその成分に寄与していることがわかります。



Project ウィンドウのモデル行をダブルクリックし、Model ウィンドウの詳細を表示します。

Number	Model	Type	A	N	R2X(cum)	R2X(cum)	R2X(cum)	Date	Title
1	M1	MOCA	Autofitted	92				2020/01/21	

こちらでは、作成したモデルの詳細を見ることができます。

Model type: MOCA, observations (N): 92, variables (K): 33 (xin=7, xmd=18, y=8)

Title:  Enter model title

Workset Options

Component		R2X	R2X(cum)	R2X	R2X(cum)	R2X	R2X(cum)
Model			0.415		0.599		0.569
Blocks		xin		xmd		y	
Joint components			0.415		0.599		0.569
1		0.192	0.192	0.278	0.278	0.202	0.202
2		--	--	0.178	0.456	0.248	0.45
3		0.223	0.415	0.0694	0.525	--	--
4		--	--	0.0738	0.599	0.119	0.569
Unique components		0		0		0	

Global Joint (全共通変動)

Local Joint (一部共通変動)

ウィンドウでは、ブロックごとに Joint と Unique それぞれの成分で得られた寄与率 R2 と累積寄与率 R2(cum)が表示されます。

例えば、y ブロックの Joint 成分では、R2 の値は第 1 成分から順に 0.202、0.248、0、0.119 となり、累積では 0.569 となります（図中①）。

また、第 2 成分（図中②）では、xin ブロックが成分として抽出されていないため、この成分は xmd と y の 2 ブロックで一部共通変動（Local Joint）であることがわかります。

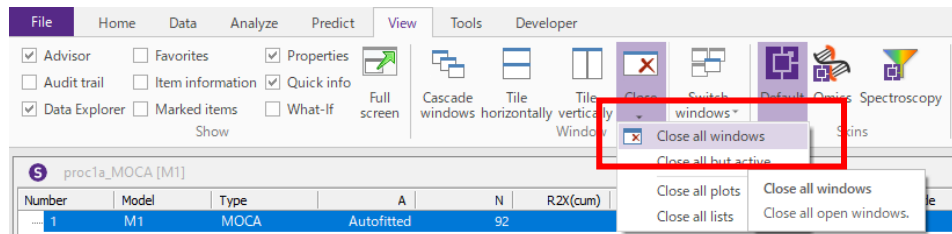
つまり、全 Joint 成分の内、最初の 1 成分のみが全ブロックでの共通変動（Global Joint）、2～4 成分は一部共通変動（Local Joint）として抽出されていることがわかります。

このように Model ウィンドウでは、各ブロック、各成分の情報を一覧で見ることが可能です。

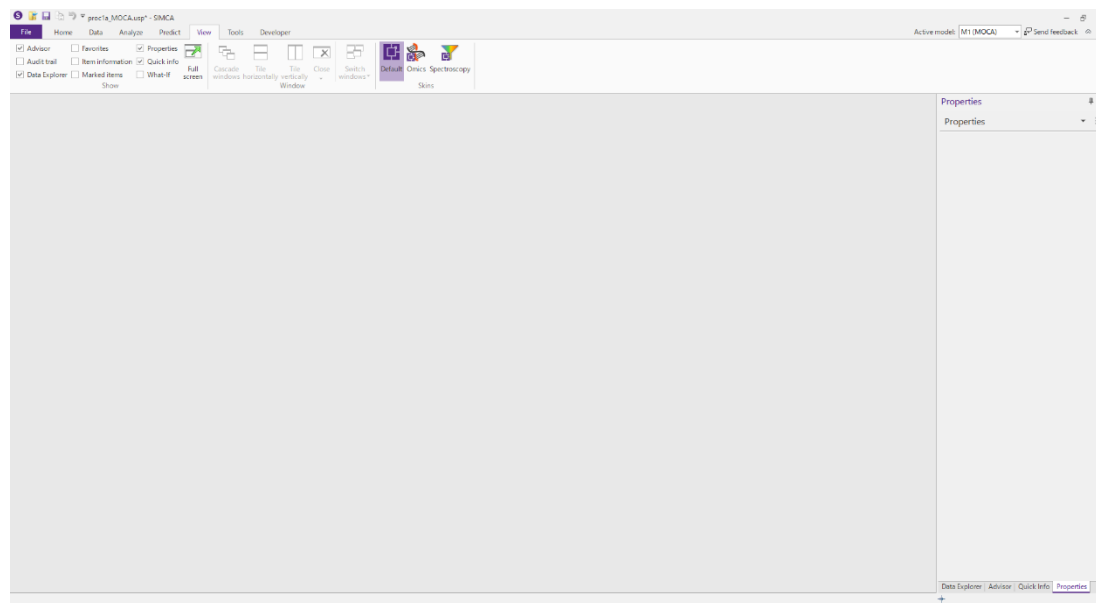
## モデルの表示

プロットを表示する前に、一度開いている全てのウィンドウを閉じます。

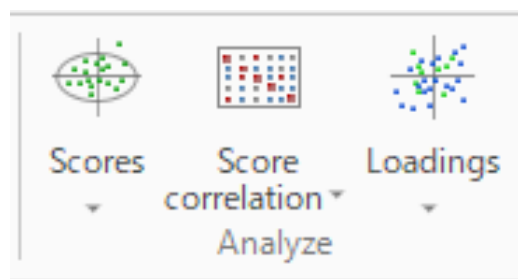
View > Close > Close all windows をクリックします。



開いていた全てのウィンドウが閉じ、下図のような状態となります。



MOCA では、Home リボンにて、以下のボタンが表示されます。

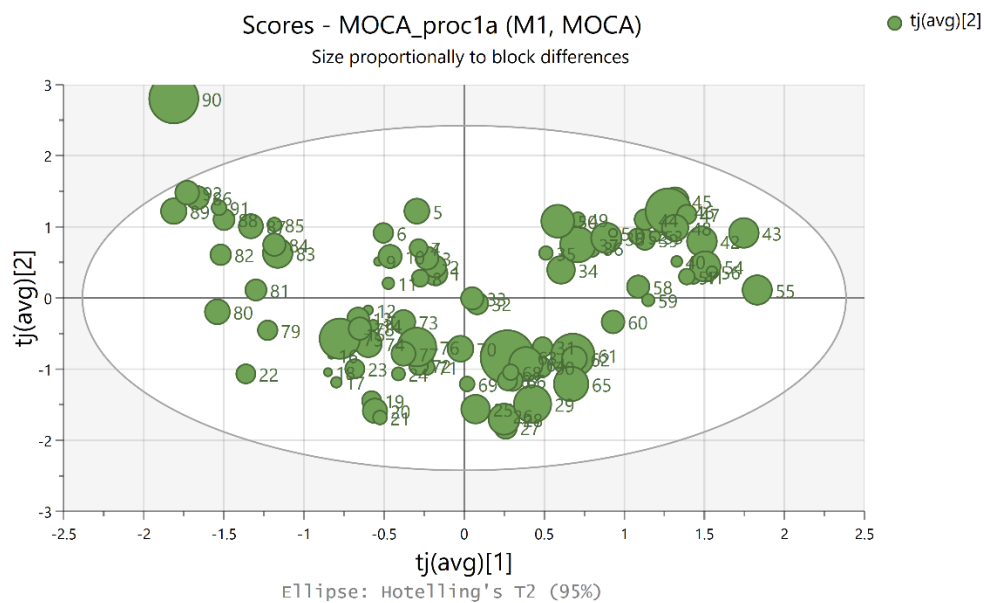
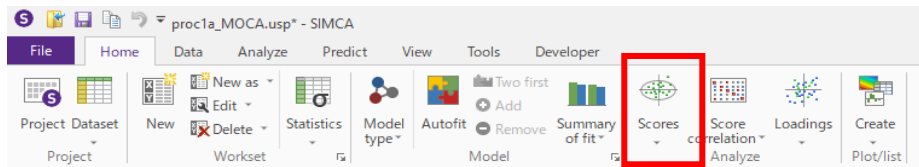




## スコアプロット

Scores をクリックし、スコアプロットを表示します。

スコアプロットでは 1 時間ごとのプロセス状態の分布を見ることができます。

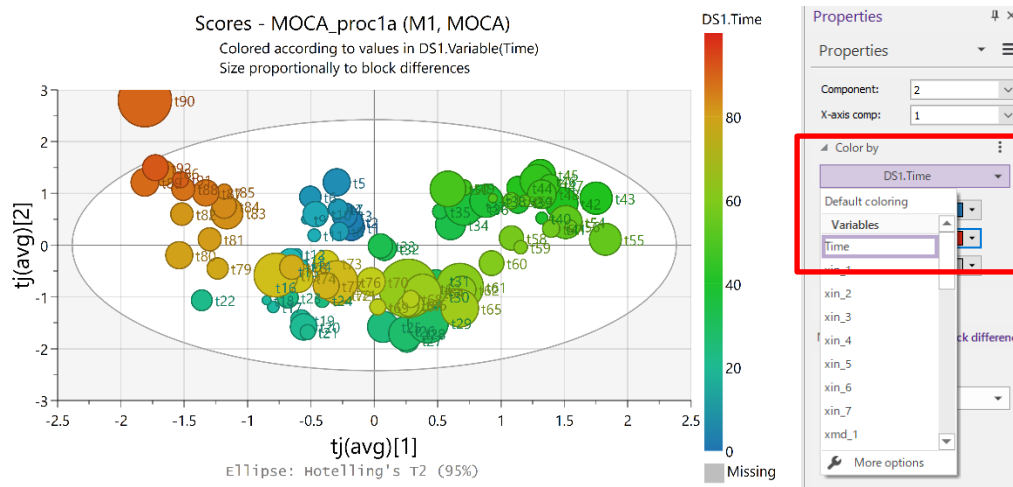


MOCA のスコアプロットでは、デフォルトで全ブロックの Joint スコアの平均  $tj(avg)$  が表示されます。

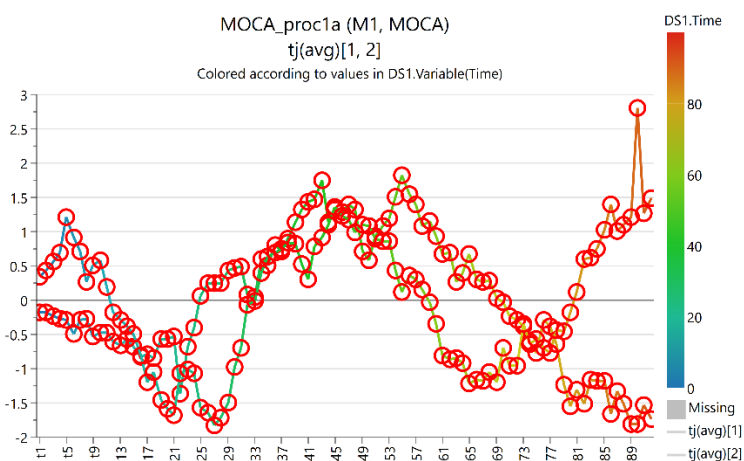
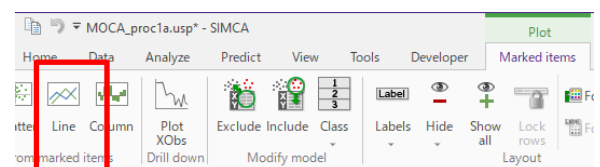
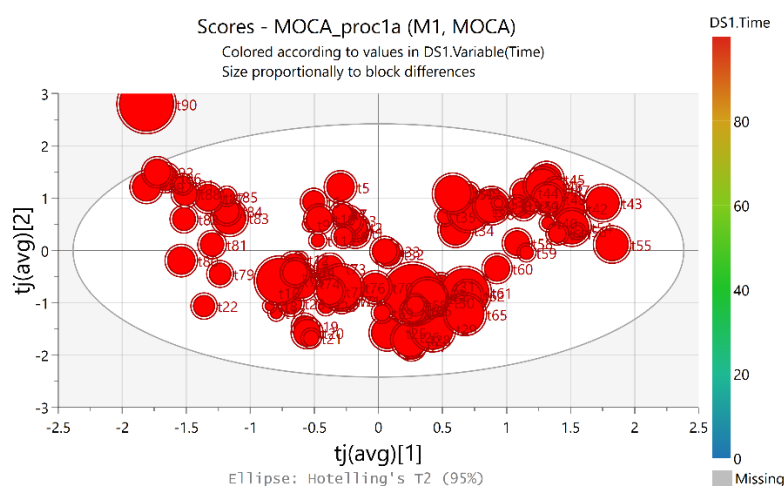
丸の大きさは、ブロック間での、サンプル位置のばらつきの大きさを表します。小さい丸のサンプルは各ブロックでほぼ同じ位置にプロットされ、大きい丸のサンプルは各ブロックで、プロットされる位置がばらついていることを表しています。

時系列による変化を可視化します。

平均のスコアプロットをクリックし、Properties タブ > Color by > Time で色を変更します。

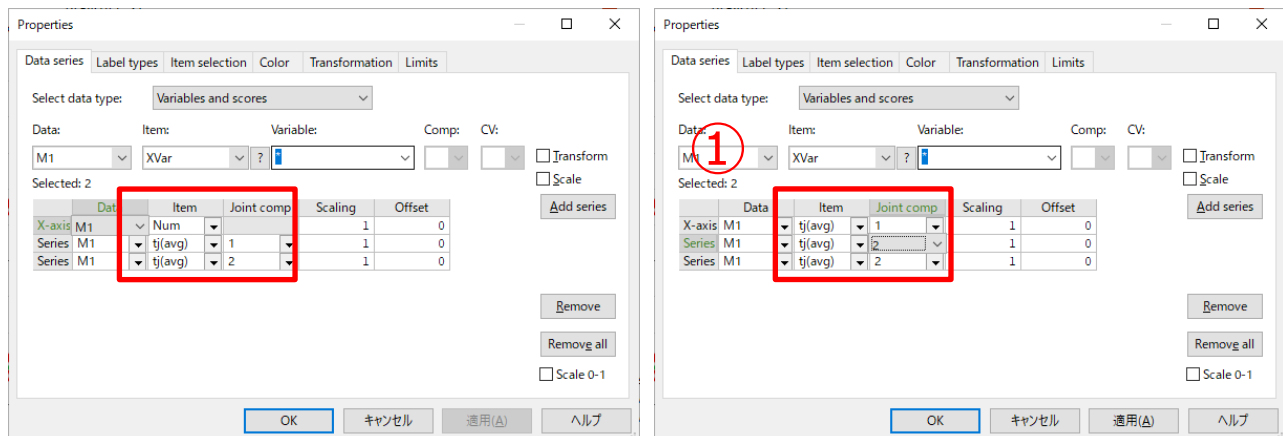


マウスでスコアプロットの全ての点を選択し、Marked items タブ > Line をクリックします。

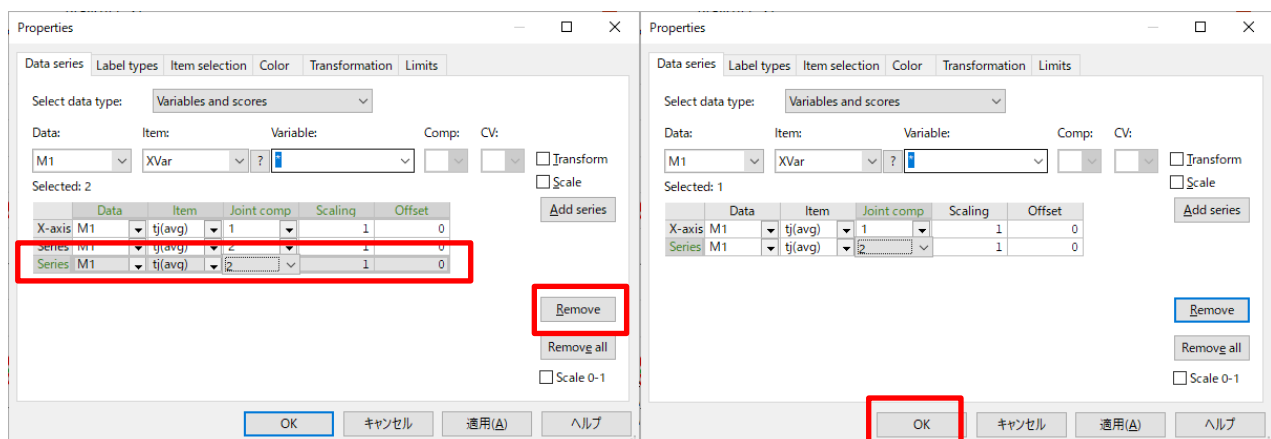


表示された Line Plot 上で右クリック > Properties を選択し、Properties の画面を開きます。

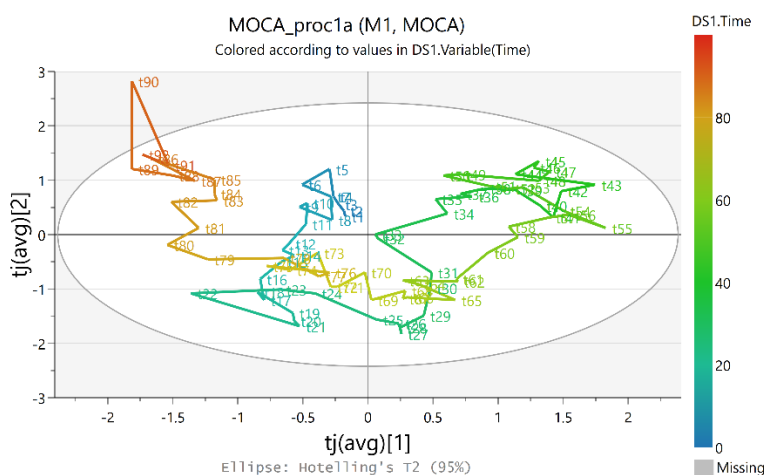
赤枠の部分を下図①のように変更します。



3 行目の Series を選択し、Remove をクリック。OK をクリックします。



各点が線で結ばれ、時間経過にとサンプルの変動を確認することができます。

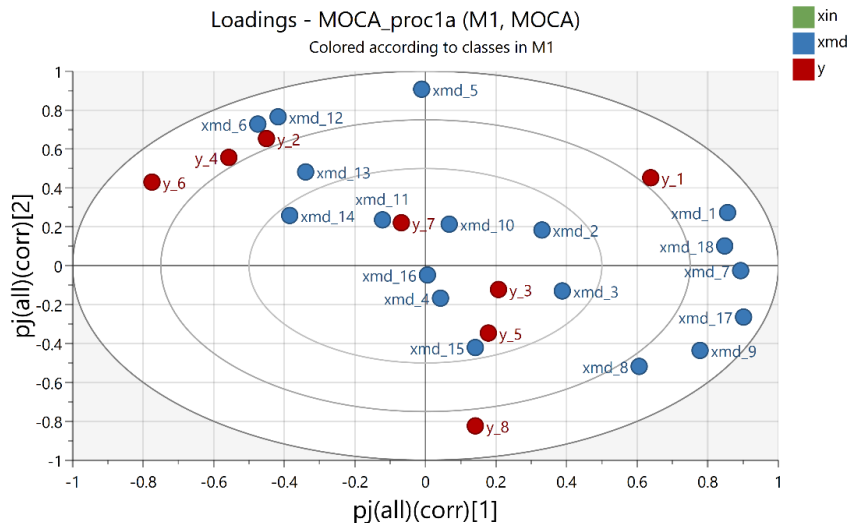
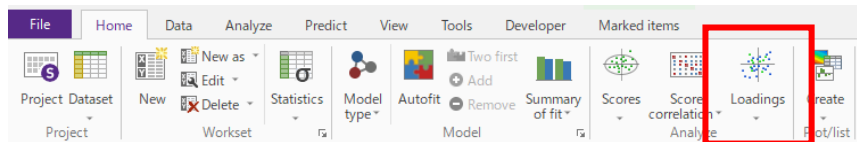


中央上部から始まり、時間経過とともに左下から右上へ移動、その後中央を通りながら左上側へ移動していることがわかります。

## Loading Plot

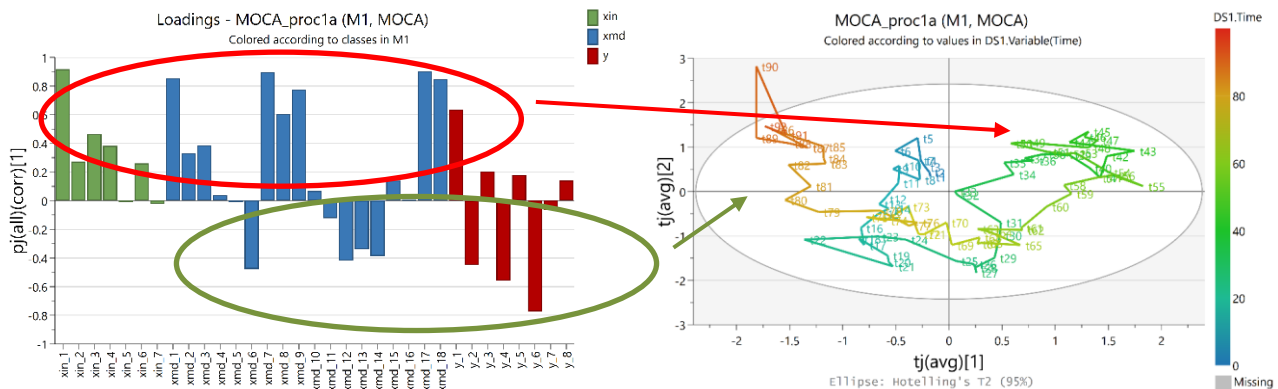
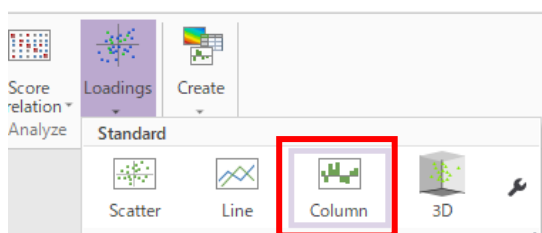
Home > Loadings をクリックし、ローディングプロットを表示します。

スコアプロットと同様に、全ブロックの平均のローディング  $pj(all)$  が表示されます。



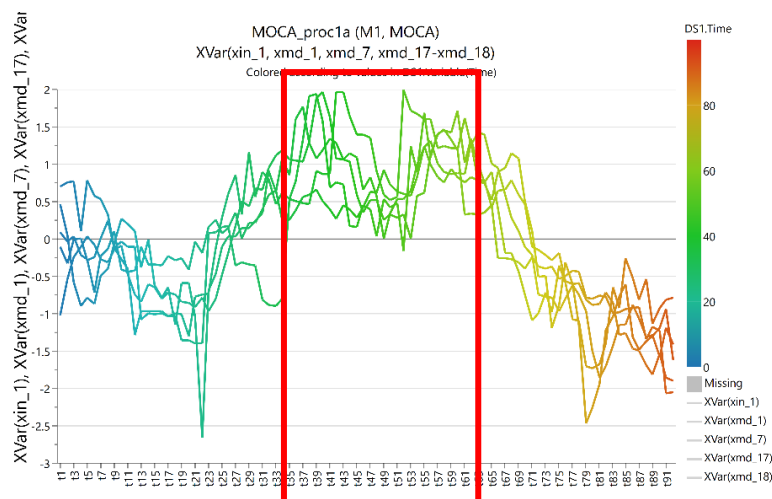
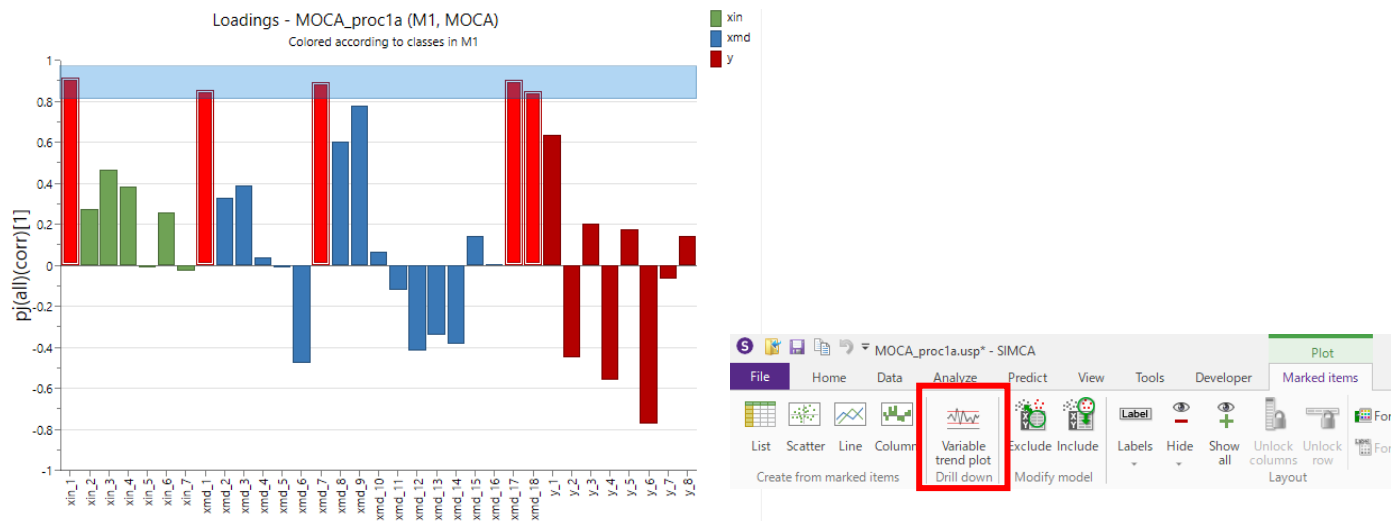
縦軸、第 2 成分には xin ブロックが抽出されていないため、このプロットでは xin に属する変数が表示されていません。

第 1 成分に寄与する変数について、Loadings > Column でカラムプロットを表示し、確認します。



スコアプロットと比較すると、正の相関をもつ変数はプロセスの中間 40~60 の時間で特徴的で、一方で、プロセスの後半 60~80 の時間では負の相関をもつ変数が特徴的に現れてきていることがわかります。

例として、第 1 成分のローディングカラムプロットにて 0.8 以上の相関を持つ 5 変数を選択し、Variable trend plot をクリックします。



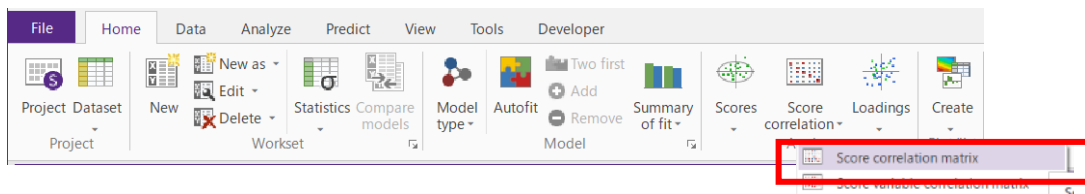
選択した 5 変数は、特にプロセスの中間で特徴的となる変数であることがわかります。このことはスコアプロットでも確認できていました。

### 3. MOCA ツールを使用する

#### スコア相関行列

スコア相関行列（Score correlation matrix）は、モデルの品質をチェックするためのツールです。

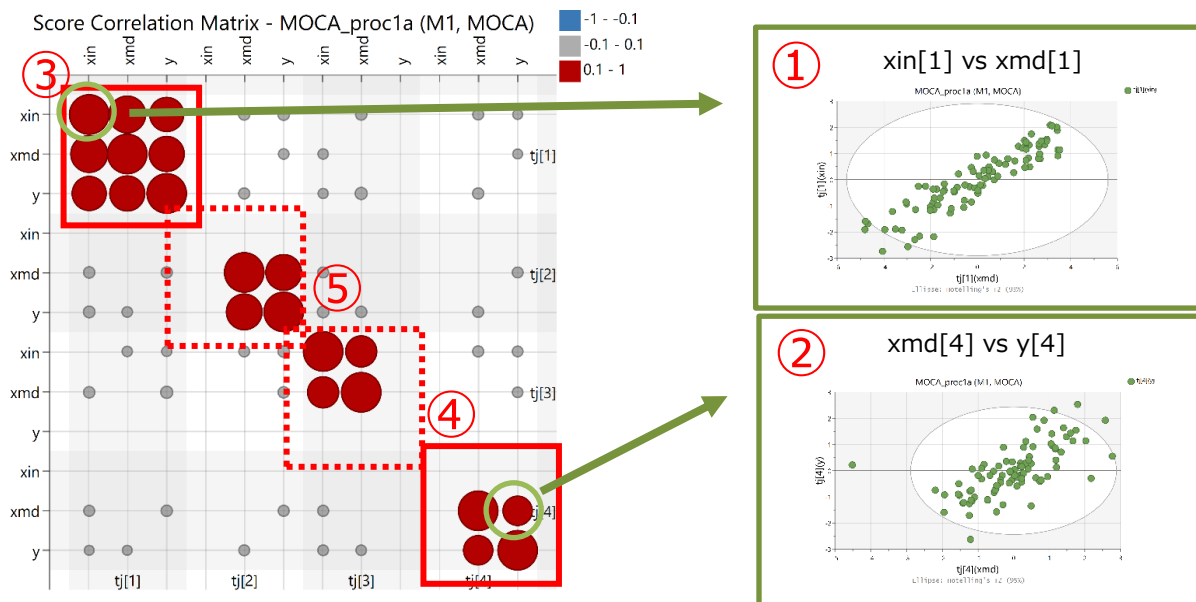
Home > Score correlation > Score correlation matrix をクリック、スコア相関行列を表示します。



ここではブロック間の相関関係を Joint と Local の成分ごとに表されています。

赤色は正の相関、青色は負の相関を表し、丸の大きさは、相関の強さを表します。ダブルクリックで表示される図の①、②にて、丸の大きさがどの程度の相関を表しているかを確認することができます。

例えば、左上の赤枠③は第 1 成分における 3 ブロックの相関関係を表し、④は第 4 成分における 3 ブロックの相関関係を表します。③では全ての丸が大きいので、全ブロックで共通の変動（Global Joint）を持っていることが確認できます。一方、④では xin は Joint の成分としては検出されず、残りの 2 ブロックでのみ相関を持つ、一部共通変動(Local Joint)を持っていることがわかります。このことは、Model ウィンドウ（P.12）でも確認できていました。



もし、左斜めの対角線（③、④、⑤の枠）以外で強い相関が確認できた場合、そのブロックに大きな外れ値が含まれている可能性があり、さらなる調査が必要です。ここではそのような相関は見られないので、良いモデルが得られていると判断できます。

## スコア変数相関行列

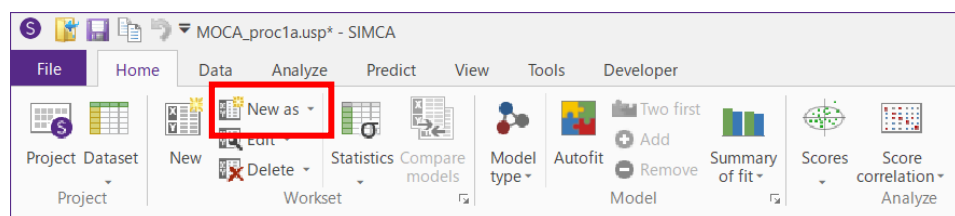
スコア変数相関行列（Score variable correlation matrix）では、モデルに使わなかった変数や、新しく得られた外部変数について、作成したモデルとの相関関係を調べることが可能です。

たとえば、

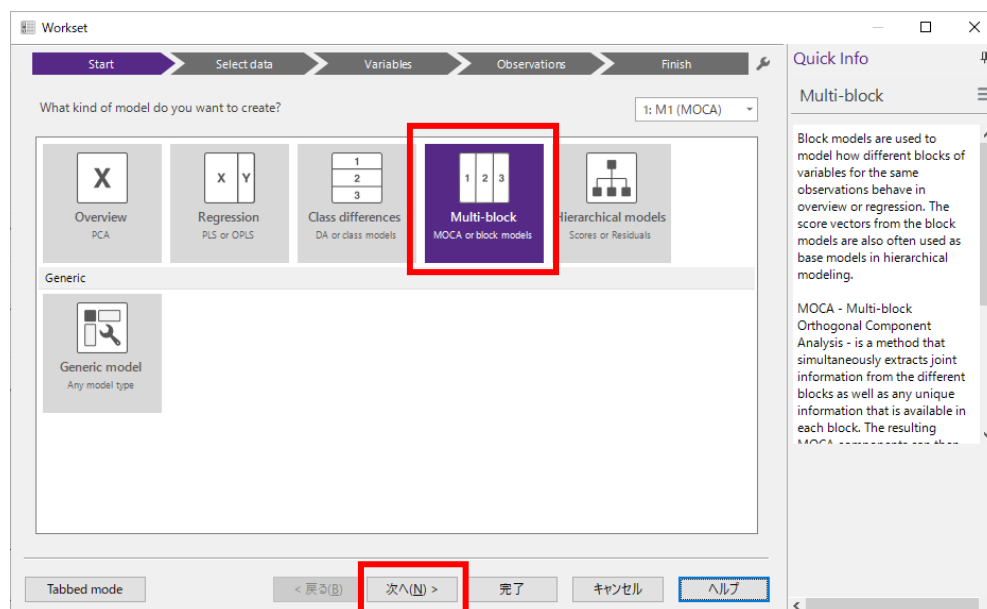
- ・ 製造プロセスデータの MOCA モデルと、出荷後の品質（クレーム情報）との関係
- ・ 疾患オミックスデータの MOCA のモデルと、血液検査や生化学検査などの臨床データとの関係

などを調査するのに有効です。

Home > New as をクリックします。

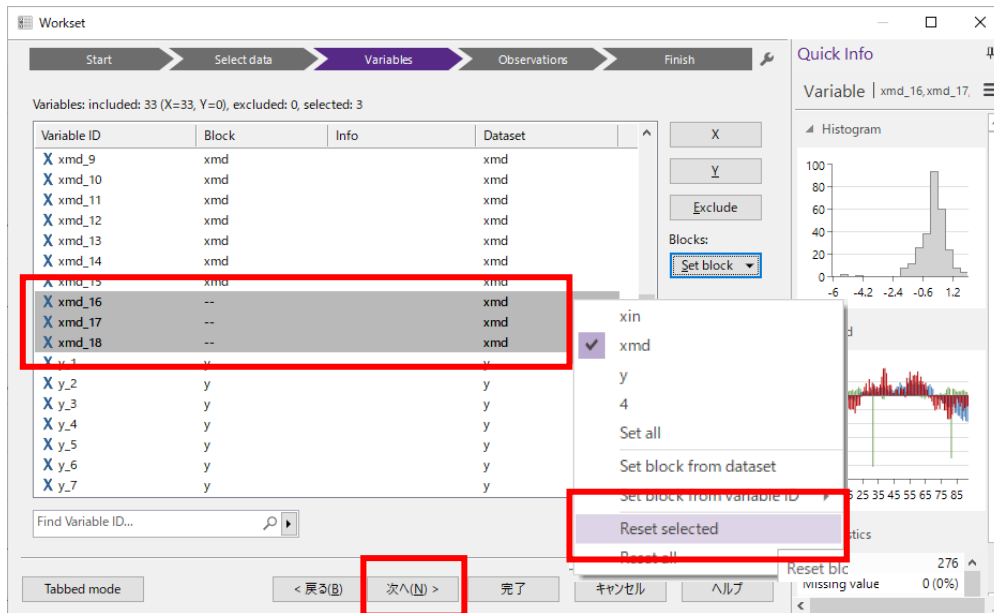


MOCA を選択し、次へをクリックします。



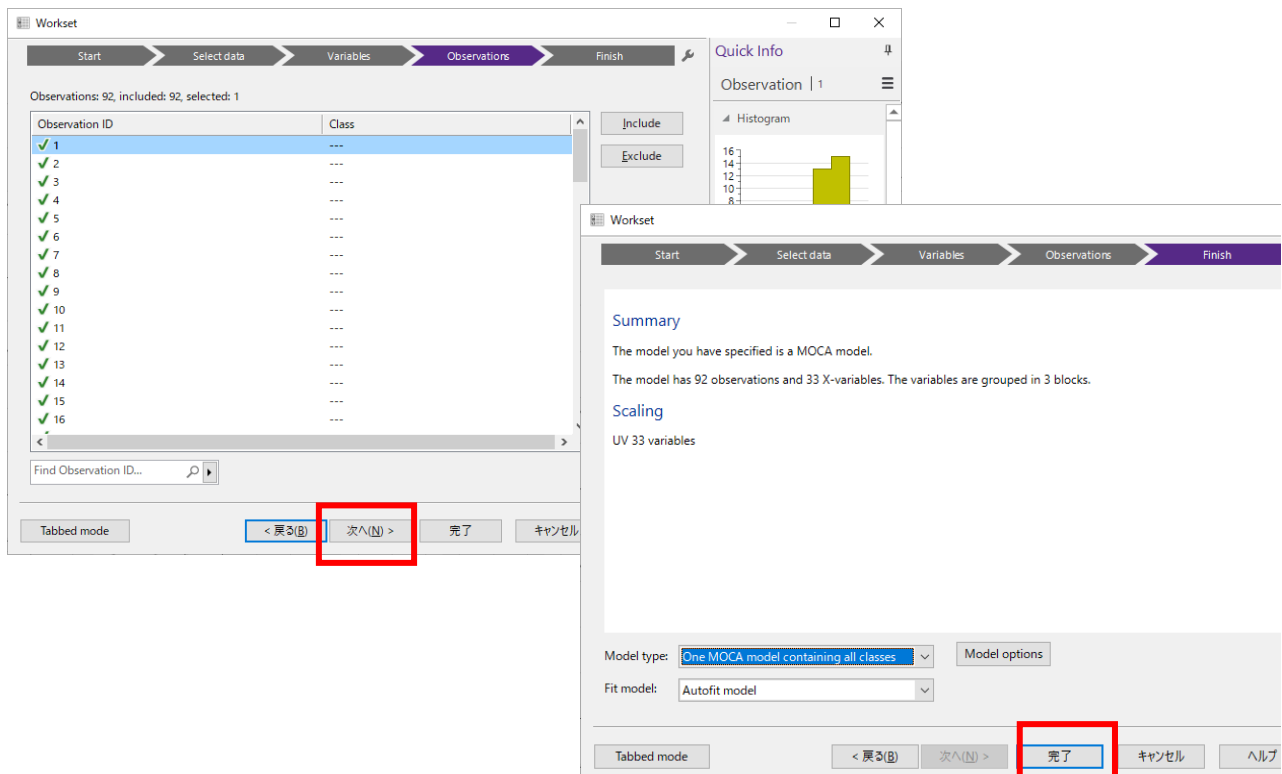
ここでは、xmd\_16~18 を外部変数と仮定し、この 3 変数を除いた変数で MOCA モデルを作成します。

xmd\_16~18 を選択し、Blocks のプルダウンから Reset Selected をクリックします



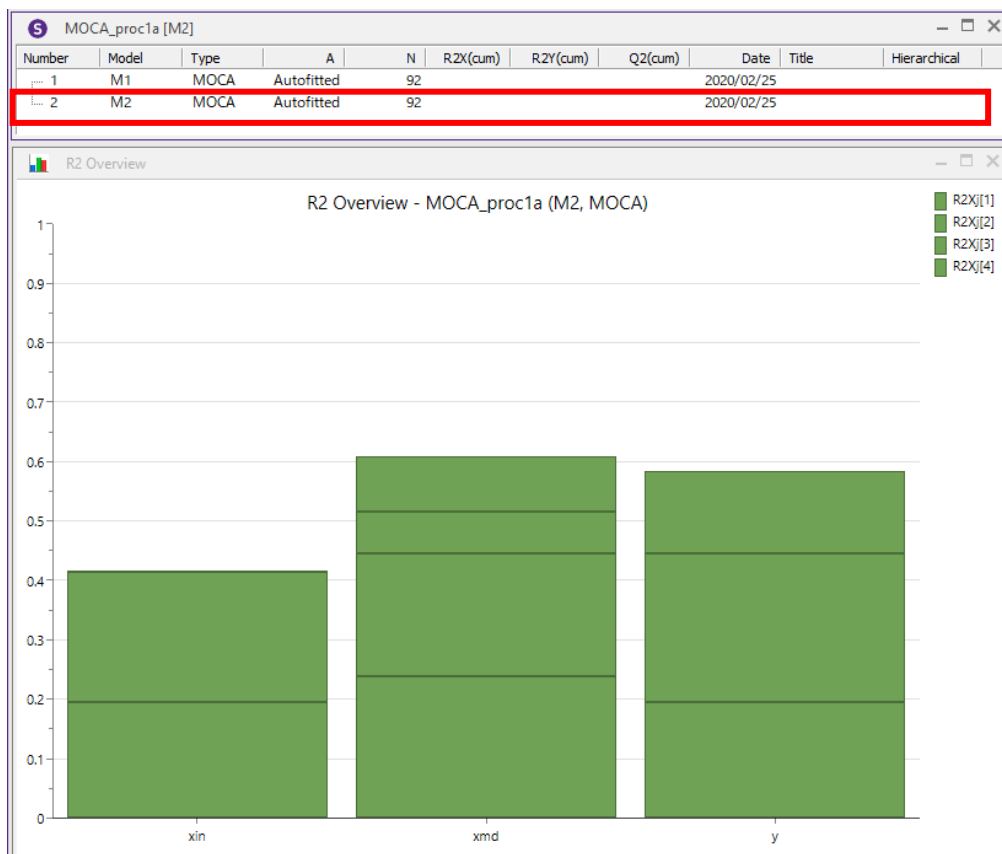
Block がリセットされ、「---」の表示になっていることを確認し、次へをクリックします。

Observation、Summary 画面は変更ありません。次へ、および完了をクリックします。

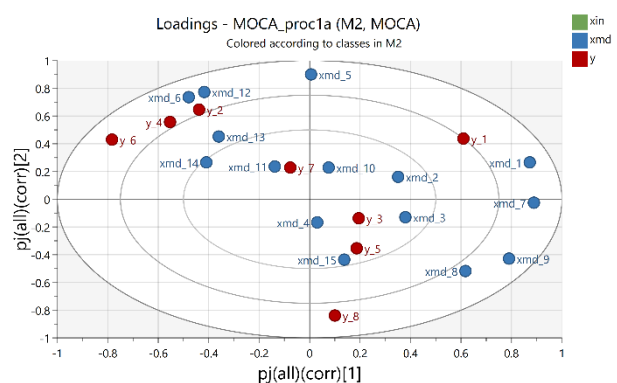
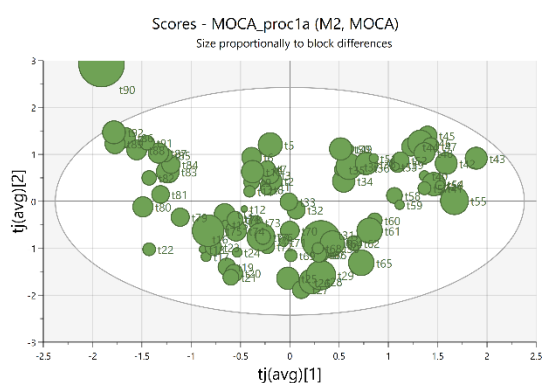
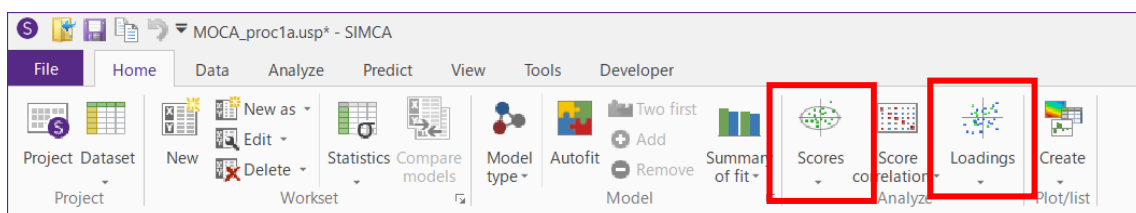




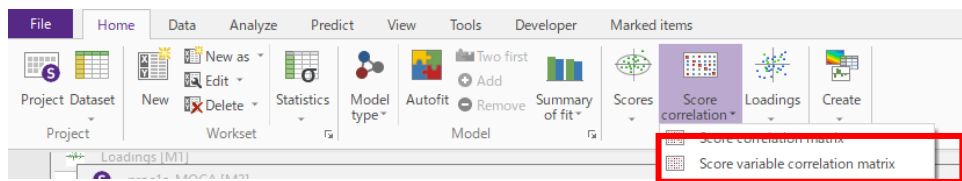
新たにモデルが作成されます。



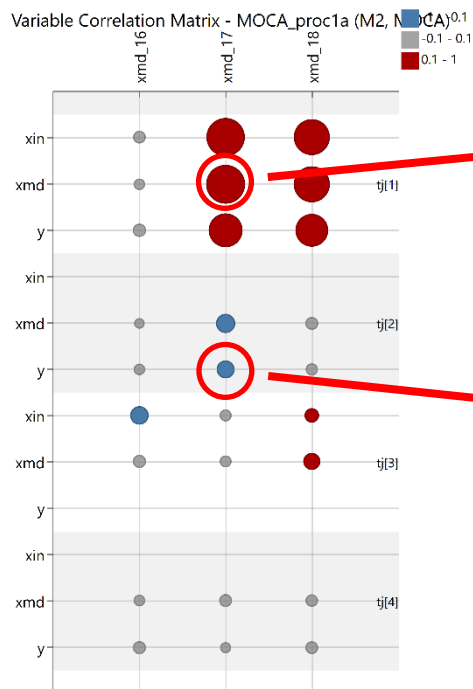
スコア、ローディングプロットを表示します。



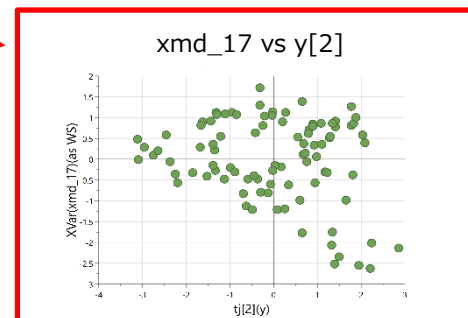
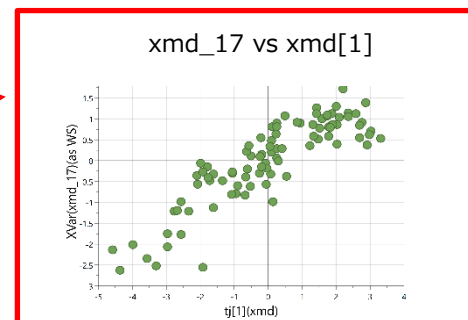
Home > Score correlation > Score variable correlation matrix をクリックします。



先程 Block をリセットした 3 変数（縦軸）について、成分ごと（横軸）のスコア変数相関行列が表示されます。赤、青が相関の正負を、丸の大きさが相関の大きさを表します。



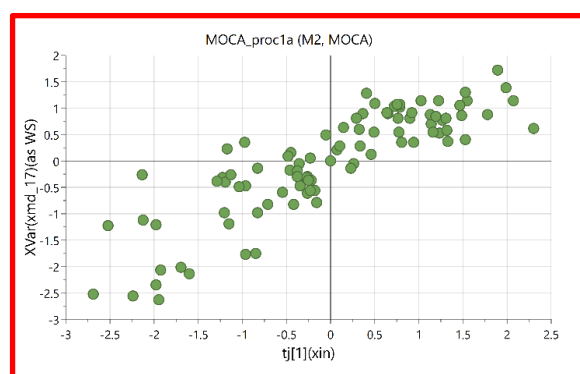
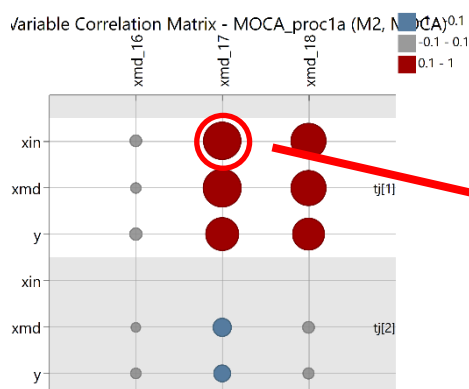
ダブルクリックで表示



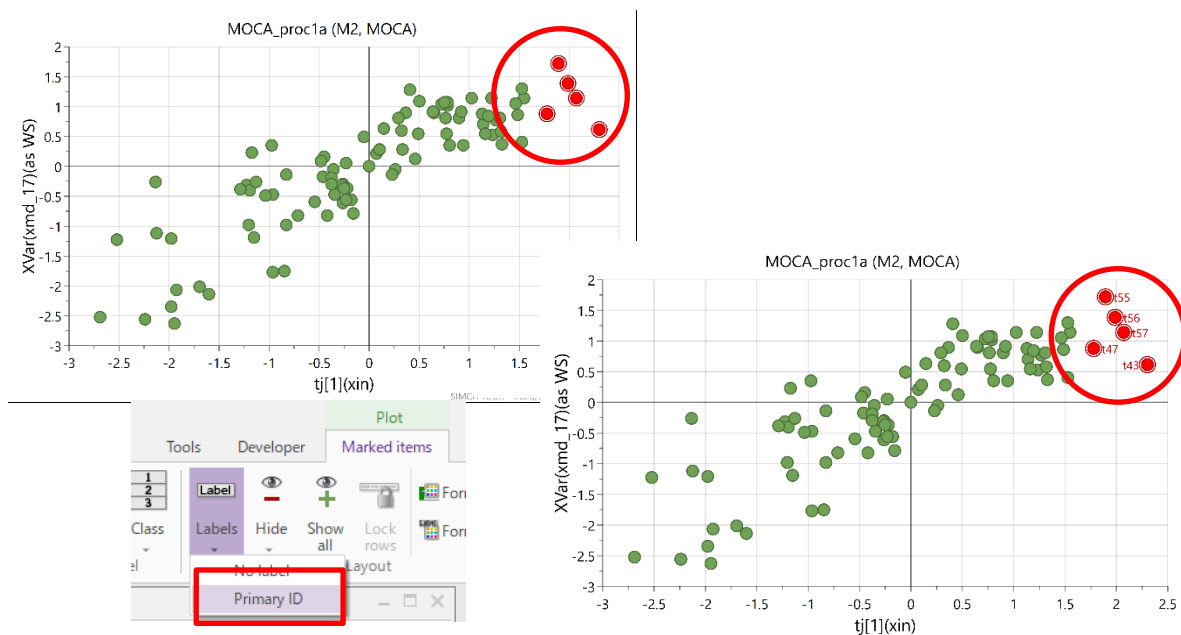
例えば、xmd\_17,18 は第 1 成分の xin,xmd,y と正の相関を持ちます。その他に xmd\_17 は第 2 成分の xmd,y と僅かに負の相関を、xmd\_16 は第 3 成分の xin と僅かに負の相関を持つことがわかります。

例として、xmd\_17 が第 1 成分の xin ブロックと正の相関をもつことについて、詳細に見ていきます。

下図の点をダブルクリックすると、確かに正の相関を持っていることがわかります。

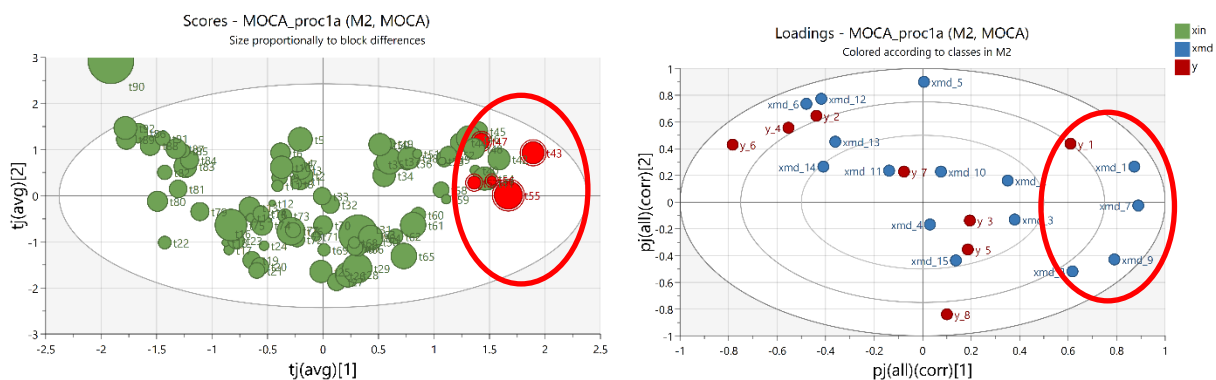


下図の点を選択し、Marked items タブ > Labels > Primary ID にてラベル付けしておきます。



スコアプロットでも該当の点が自動でハイライトされます。

これとローディングプロットを照らし合わせると、xmd\_17 は y\_1、xmd\_1,7,8,9 は、と正の相関を持つことがわかります。



例えば、xmd\_17 が出荷後の品質パラメータ値であり、値が大きいほど品質が良いとすると、良い品質と関係のある変数が右側に、クリーム品と関係のある変数が左側にあることがわかります。

このように、スコア変数相関行列では、作成した MOCA モデルに対し追加の外部変数パラメータを加えることで、その変数との関係性を調べることが可能です。

## ◆既知の問題

Class ID を設定すると、MOCA モデルの作成に必要な「Block」の設定ができなくなります。

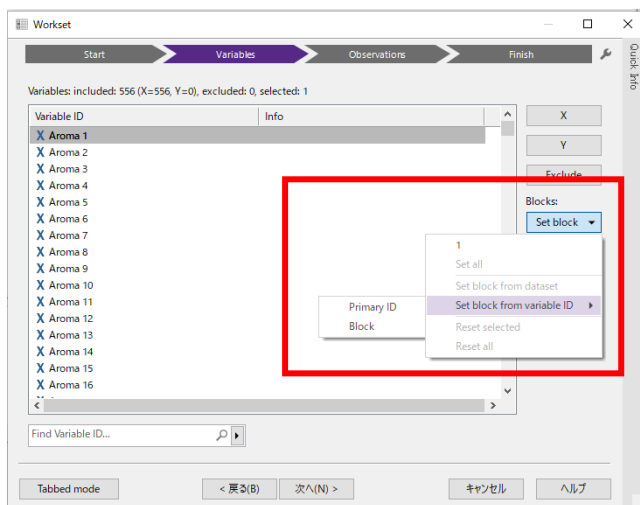
## ■症状

Import 画面で、Class ID を設定。

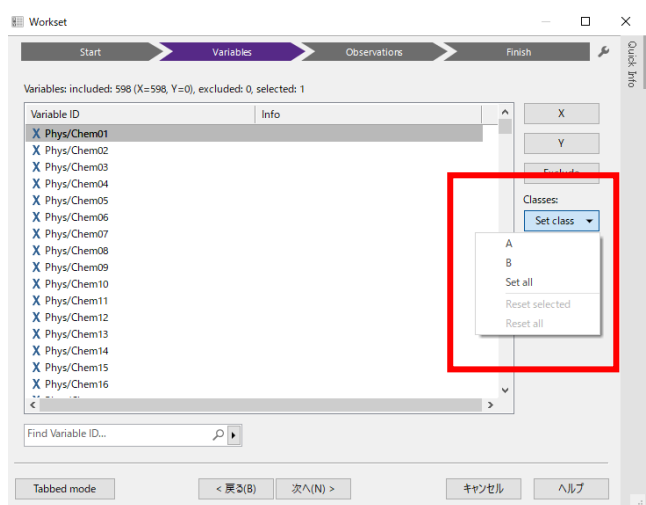
Primary ID	Secondary ID	Class ID	Aroma 1	Aroma 2	Aroma 3	Aroma 4	Aroma 5	Aroma 6	Aroma 7	Aroma 8	Aroma 9
1	Product 1	0.00402462	0	0.0241489	0	0.474929	0	0.04	0	0.03	0
2	Product 2	0.00459514	0	0.0413563	0	0.0137854	0	0.02	0	0.04	0
3	Product 3	0.0037397	0	0.0446764	0.00186985	0.0245081	0	0.02	0	0.04	0
4	Product 4	0	0	0.0322749	0	0.107583	0	0.04	0	0.04	0
5	Product 5	0.00319718	0	0.0287746	0	0.0191831	0	0.0	0	0.04	0
6	Product 6	0.00608579	0	0.0486863	0	0.0182574	0	0.006	0	0.04	0
7	Product 7	0.00302667	0.00605333	0.0605333	0	0.00908	0.0242133	0.1	0	0.04	0
8	Product 8	0.00594241	0.0029712	0.0564529	0	0.00891361	0	0.1	0	0.04	0
9	Product 9	0.0106573	0.0213146	0.0639437	0.0373005	0.00532864	0	0.1	0	0.04	0
10	Product 10	0.00718354	0	0.0431013	0.00359177	0.0502848	0	0.08	0	0.04	0
11	Product 11	0.00548309	0	0.0438647	0	0.0137077	0	0.04	0	0.04	0
12	Product 12	0.00192047	0	0.0460914	0	0.00576142	0.00576142	0.04	0	0.04	0
13	Product 13	0.00439072	0	0.234903	0.00219536	0.0285397	0.00878143	0.06	0	0.04	0
14	Product 14	0.00418819	0	0.0586347	0.00418819	0.0167528	0.00418819	0.07	0	0.04	0
15	Product 15	0.00281289	0	0.0281289	0	0.0337546	0.00281289	0.02	0	0.04	0
16	Product 16	0	0	0.0610215	0	0.299005	0.00610215	0.11	0	0.04	0

Workset > Variables の設定画面で “Block” の選択が消え、“Classes” が表示されています。

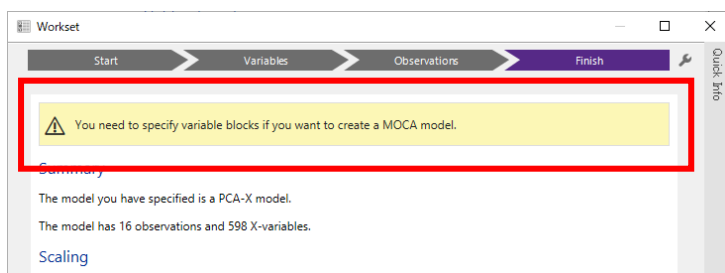
通常：Blocks が表示



エラー：Classes が表示



Variables は Class 設定の必要はないため、特に設定をせず Workset を進めると、Block の設定がされていないため MOCA モデルが作成できない、というエラーが表示されます。



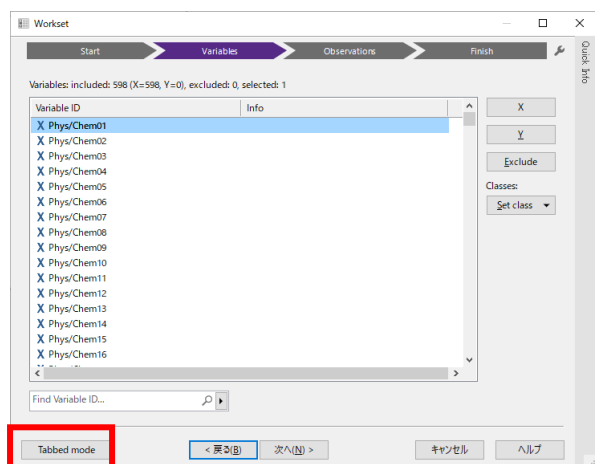
## ■ 対処法

### ① Class ID を使用しない

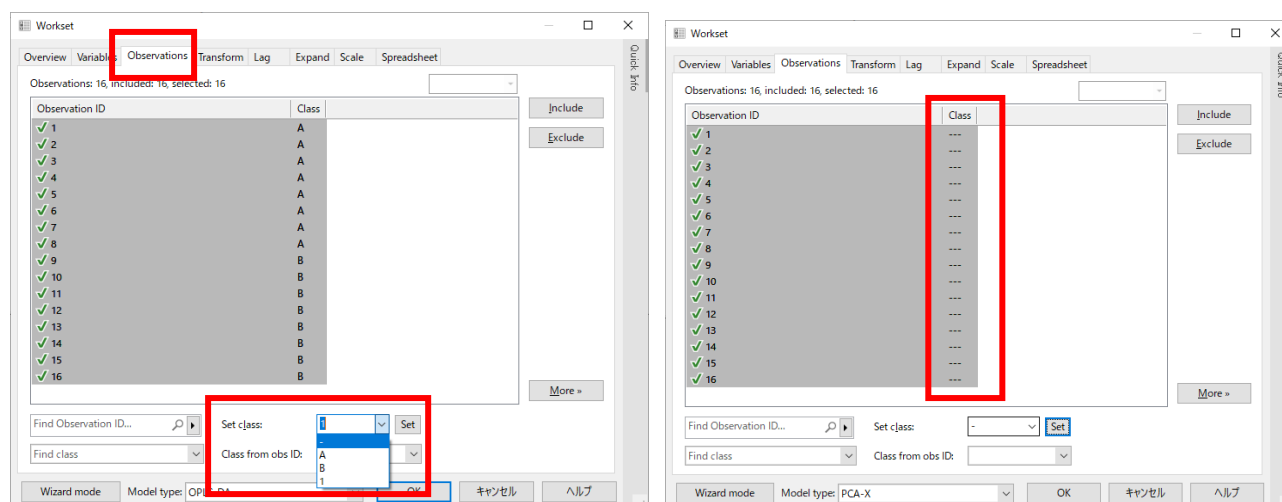
最初のデータインポート画面にて、Class ID を使用せず、Secondary ID を設定していれば、このような症状は起こりません。そのため、MOCA では Class ID を設定されないことを推奨します。

### ② (Class ID を設定した場合) Tabbed mode 画面にて、Class 設定を解除する

Workset の左下 Tabbed mode をクリックし Tabbed モードの画面に変更します。



Observations タブにて、Ctrl + A で全ての Observation を選択、Set classes を "-" に変更し、Set をクリックします。クラス情報が無効にされたことを確認します。



これにより、Variables タブの Block 設定ボタンが復活します。

このまま Tabbed モードのままでも、Wizard モードに戻しても、設定を進めることが可能です。

