

【公報種別】特許法第17条の2の規定による補正の掲載

【部門区分】第6部門第1区分

【発行日】令和7年6月2日(2025.6.2)

【公開番号】特開2024-178751(P2024-178751A)

【公開日】令和6年12月25日(2024.12.25)

【年通号数】公開公報(特許)2024-242

【出願番号】特願2023-97130(P2023-97130)

【国際特許分類】

**G 0 1 N 24/08 (2006.01)**

10

【F I】

G 0 1 N 24/08 5 1 0 Q

G 0 1 N 24/08 5 1 0 D

【手続補正書】

【提出日】令和7年5月23日(2025.5.23)

【手続補正1】

【補正対象書類名】特許請求の範囲

【補正対象項目名】全文

【補正方法】変更

20

【補正の内容】

【特許請求の範囲】

【請求項1】

複数の試料のそれぞれに対してNMR測定を行うことで生成され、時間軸と周波数軸とで規定される第1座標系上の複数のスペクトログラムを取得する取得手段と、

前記複数のスペクトログラムからなるデータセットに対して多変量解析を実行することで、前記複数の試料を試料属性毎に分離するための主成分を生成する多変量解析手段と、

前記多変量解析手段による多変量解析の結果として、前記主成分に対応するローディング値の分布を生成する分布生成手段と、

前記ローディング値の分布から、時間軸と周波数軸とで規定される第2座標系上で各ローディング値を表現するローディングプロットを生成するプロット生成手段と、  
を含み、

前記第2座標系は前記第1座標系と同じである、  
ことを特徴とするデータ処理装置。

【請求項2】

請求項1に記載のデータ処理装置において、

指定された試料のスペクトログラムと前記ローディングプロットとを並べてディスプレイに表示させる表示制御手段を更に含む、

ことを特徴とするデータ処理装置。

【請求項3】

請求項1に記載のデータ処理装置において、

前記ローディングプロット上にて時間範囲と周波数範囲とによって解析領域を特定する特定手段を更に含み、

前記多変量解析手段、前記分布生成手段及び前記プロット生成手段は、前記解析領域を対象としてそれぞれの処理を実行する、

ことを特徴とするデータ処理装置。

【請求項4】

請求項3に記載のデータ処理装置において、

前記特定手段は、前記ローディングプロット上にて前記時間範囲と前記周波数範囲とがユーザーによって指定されると、前記ユーザーによって指定された前記時間範囲と前記周

40

50

波数範囲とで規定される領域を前記解析領域として特定する、  
ことを特徴とするデータ処理装置。

【請求項 5】

請求項 3 に記載のデータ処理装置において、  
前記特定手段は、時間範囲と周波数範囲とによって規定される領域であってローディング値が特定の範囲内に含まれる領域を前記解析領域として特定する、  
ことを特徴とするデータ処理装置。

【請求項 6】

請求項 1 に記載のデータ処理装置において、  
前記プロット生成手段は、前記ローディング値の分布を座標変換することで前記ローディングプロットを生成する、  
ことを特徴とするデータ処理装置。

【請求項 7】

コンピュータを、  
複数の試料のそれぞれに対して NMR 測定を行うことで生成され、時間軸と周波数軸とで規定される第 1 座標系上の複数のスペクトログラムを取得する取得手段、  
前記複数のスペクトログラムからなるデータセットに対して多変量解析を実行することで、前記複数の試料を試料属性毎に分離するための主成分を生成する多変量解析手段、  
前記多変量解析手段による多変量解析の結果として、前記主成分に対応するローディング値の分布を生成する分布生成手段、  
前記ローディング値の分布から、時間軸と周波数軸とで規定される第 2 座標系上で各ローディング値を表現するローディングプロットを生成するプロット生成手段、  
として機能させるプログラムであって、  
前記第 2 座標系は前記第 1 座標系と同じである、  
ことを特徴とするプログラム。

【請求項 8】

複数の試料のそれぞれに対して NMR 測定を行うことで生成され、時間軸と周波数軸とで規定される第 1 座標系上の複数のスペクトログラムを取得する第 1 ステップと、  
前記複数のスペクトログラムからなるデータセットに対して多変量解析を実行することで、前記複数の試料を試料属性毎に分離するための主成分を生成する第 2 ステップと、  
前記第 2 ステップによる多変量解析の結果として、前記主成分のローディング値の分布を生成する第 3 ステップと、  
前記ローディング値の分布から、時間軸と周波数軸とで規定される第 2 座標系上で各ローディング値を表現するローディングプロットを生成する第 4 ステップと、  
を含み、  
前記第 2 座標系は前記第 1 座標系と同じである、  
ことを特徴とする特性評価方法。

【手続補正 2】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0 0 0 9

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0 0 0 9】

本開示の 1 つの態様は、複数の試料のそれぞれに対して NMR 測定を行うことで生成され、時間軸と周波数軸とで規定される第 1 座標系上の複数のスペクトログラムを取得する取得手段と、前記複数のスペクトログラムからなるデータセットに対して多変量解析を実行することで、前記複数の試料を試料属性毎に分離するための主成分を生成する多変量解析手段と、前記多変量解析手段による多変量解析の結果として、前記主成分に対応するローディング値の分布を生成する分布生成手段と、前記ローディング値の分布から、時間軸と周波数軸とで規定される第 2 座標系上で各ローディング値を表現するローディングプロット

10

20

30

40

50

トを生成するプロット生成手段と、を含み、前記第2座標系は前記第1座標系と同じである、ことを特徴とするデータ処理装置である。

本開示の1つの態様は、複数の試料のそれぞれに対してNMR測定を行うことで生成され、時間と周波数とで規定される複数のスペクトログラムを取得する取得手段と、前記複数のスペクトログラムに対して多変量解析を実行することで、前記複数の試料を試料の属性毎に分離するための主成分を生成する多変量解析手段と、前記多変量解析手段による多変量解析の結果に基づいて、前記複数のスペクトログラムに含まれる時間情報と周波数情報とによって定められる指数に対する特定の主成分のローディング値の分布を生成する分布生成手段と、前記ローディング値の分布から、時間と周波数とで規定されるグラフ上で前記特定の主成分のローディング値を表現するローディングプロットを生成するプロット生成手段と、を含むことを特徴とするデータ処理装置である。

10

### 【手続補正3】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0015

【補正方法】変更

【補正の内容】

#### 【0015】

本開示の1つの態様は、コンピュータを、複数の試料のそれぞれに対してNMR測定を行うことで生成され、時間軸と周波数軸とで規定される第1座標系上の複数のスペクトログラムを取得する取得手段、前記複数のスペクトログラムからなるデータセットに対して多変量解析を実行することで、前記複数の試料を試料属性毎に分離するための主成分を生成する多変量解析手段、前記多変量解析手段による多変量解析の結果として、前記主成分に対応するローディング値の分布を生成する分布生成手段、前記ローディング値の分布から、時間軸と周波数軸とで規定される第2座標系上で各ローディング値を表現するローディングプロットを生成するプロット生成手段、として機能させるプログラムであって、前記第2座標系は前記第1座標系と同じである、ことを特徴とするプログラムである。

20

本開示の1つの態様は、コンピュータを、複数の試料のそれぞれに対してNMR測定を行うことで生成され、時間と周波数とで規定される複数のスペクトログラムを取得する取得手段、前記複数のスペクトログラムに対して多変量解析を実行することで、前記複数の試料を試料の属性毎に分離するための主成分を生成する多変量解析手段、前記多変量解析手段による多変量解析の結果に基づいて、前記複数のスペクトログラムに含まれる時間情報と周波数情報とによって定められる指数に対する特定の主成分のローディング値の分布を生成する分布生成手段、前記ローディング値の分布から、時間と周波数とで規定されるグラフ上で前記特定の主成分のローディング値を表現するローディングプロットを生成するプロット生成手段、として機能させることを特徴とするプログラムである。

30

### 【手続補正4】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0016

【補正方法】変更

【補正の内容】

#### 【0016】

本開示の1つの態様は、複数の試料のそれぞれに対してNMR測定を行うことで生成され、時間軸と周波数軸とで規定される第1座標系上の複数のスペクトログラムを取得する第1ステップと、前記複数のスペクトログラムからなるデータセットに対して多変量解析を実行することで、前記複数の試料を試料属性毎に分離するための主成分を生成する第2ステップと、前記第2ステップによる多変量解析の結果として、前記主成分のローディング値の分布を生成する第3ステップと、前記ローディング値の分布から、時間軸と周波数軸とで規定される第2座標系上で各ローディング値を表現するローディングプロットを生成する第4ステップと、を含み、前記第2座標系は前記第1座標系と同じである、ことを特徴とする特性評価方法である。

40

50

本開示の 1 つの態様は、複数の試料のそれぞれに対して N M R 測定を行うことで生成され、時間と周波数とで規定される複数のスペクトログラムを取得する第 1 ステップと、前記複数のスペクトログラムに対して多变量解析を実行することで、前記複数の試料を試料の属性毎に分離するための主成分を生成する第 2 ステップと、前記第 2 ステップによる多变量解析の結果に基づいて、前記複数のスペクトログラムに含まれる時間情報と周波数情報とによって定められる指標に対する特定の主成分のローディング値の分布を生成する第 3 ステップと、前記ローディング値の分布から、時間と周波数とで規定されるグラフ上で前記特定の主成分のローディング値を表現するローディングプロットを生成する第 4 ステップと、を含む特性評価方法である。

## 【手続補正 5】

10

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0 0 2 5

【補正方法】変更

【補正の内容】

## 【0 0 2 5】

周波数解析部 1 6 は、複数の試料のそれぞれの F I D 信号に対して時間周波数解析を繰り返すことで、複数の試料のそれぞれのスペクトログラムを生成する。例えば、時間周波数解析として、短時間フーリエ変換 ( S T F T ) が用いられる。スペクトログラムは、時間、周波数及び信号強度によって表現される。周波数解析部 1 6 は、時間周波数信号等の複合信号を窓関数に通して周波数スペクトルを計算することで、スペクトログラムを生成する。例えば、スペクトログラムは、時間軸と周波数軸とで規定される 第 1 座標系 としての 2 次元グラフ上で、色又は明るさによって信号成分の強度 ( 振幅 ) を表現する画像である。スペクトログラムは、時間と周波数とで規定される 2 次元形式のデータである。

20

## 【手続補正 6】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0 0 2 7

【補正方法】変更

【補正の内容】

## 【0 0 2 7】

多变量解析部 1 8 は、複数の試料から得られた複数のスペクトログラム ( データセット ) に対して多变量解析を実行することで、試料の属性の特徴が現れるスコアを算出し、スコアの算出に用いた合成变量 ( 複数のスペクトログラムを試料の属性毎に分離するための变量 ) を生成する。例えば、多变量解析は、主成分分析 ( P C A : P r i n c i p a l C o m p o n e n t A n a l y s i s ) 、 P L S 判別分析 ( P L S - D A ) 又は S I M C A ( S o f t I n d e p e n d e n t M o d e l i n g o f C l a s s A n a l o g y : 部分空間法 ) 法等である。例えば、2 つの合成变量が生成される。もちろん、生成される合成变量の数は特に限定されるものではない。

30

## 【手続補正 7】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0 0 2 8

40

【補正方法】変更

【補正の内容】

## 【0 0 2 8】

例えば、多变量解析部 1 8 は、多变量解析の一例である主成分分析を実行する。多变量解析部 1 8 は、主成分分析を実行することで、多数の变量の座標軸からなる多次元空間 中で、試料間の相違 ( 分散 ) が最も顕著に現れる少数の新しい座標軸を定義し、新しい座標軸上で各試料の座標値を算出する。新しい座標軸は「主成分軸」と呼ばれ、主成分軸に沿った变数は「主成分」と呼ばれ、主成分軸上の座標値は「スコア」と呼ばれる。各主成分は、多数の变数の線形一次式で定義され、その線形一次式内の各变数項の係数は「ローディング」又は「ローディング値」と呼ばれる。ある主成分についての各变数のローディ

50

ングは、その主成分に対する各変量の寄与度（つまり重み）を表す。多変量解析部18は、主成分空間上に複数の試料のそれぞれのスコアをプロットすることで、スコアプロットを生成する。

【手続補正8】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0029

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0029】

分布生成部20は、多変量解析部18による多変量解析の結果として、指數（インデックス）列に対応する、特定の主成分のローディング値の分布を生成する。各指數は、スペクトログラムに含まれる時間情報と周波数情報とによって定められる。 10

【手続補正9】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0030

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0030】

ローディング値の分布について詳しく説明する。各スペクトログラムは、2次元の行列（例えば、横軸が時間mを示し、縦軸が周波数nを示す行列）によって表現される。解析対象の試料の数がS個である場合、多変量解析部18は、S個のスペクトログラムを構成する各データ（つまり信号強度）をベクトル形式（s × m × n）で表現し、そのベクトル形式で表現されたデータセットに対して多変量解析を実行する。ここでは一例として、多変量解析部18は、主成分分析を実行する。その主成分分析によって得られる、試料ごとの各主成分の個々のローディング値は、指數（m × n）で識別され、つまり一次元のベクトル形式で表現される。例えば、分布生成部20は、指數（m × n）の列に対応する、第1主成分（PC-1）のローディング値の分布を生成する。ローディング値の分布は、指數（m × n）で規定されるローディング値からなる1次元形式のデータである。 20

【手続補正10】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0031

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0031】

プロット生成部22は、指數列に対応する、特定の主成分のローディング値の分布（1次元形式のデータ）から、2次元グラフ（時間軸と周波数軸とで規定される第2座標系）上で色又は明るさによって特定の主成分の各ローディング値を表現するローディングプロットを生成する。プロット生成部22は、時間軸と周波数軸とで規定される2次元グラフ上に各ローディング値をプロットすることで、ローディングプロットを生成する。例えば、プロット生成部22は、指數列に対応する、特定の主成分のローディング値の分布を座標変換することでローディングプロットを生成する。ローディングプロットは、時間mと周波数nとで規定される2次元形式のデータである。 40

【手続補正11】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0051

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0051】

多変量解析部18は、スペクトログラム42, 44, 46に対して多変量解析を実行することで複数の合成変量を生成する。ここでは一例として、多変量解析部18は、主成分

10

20

30

40

50

分析を実行することで、第1主成分（PC-1）と第2主成分（PC-2）とを生成し、各主成分のローディング値の分布と、その2つの主成分に対する各試料のスコアとを算出する。

【手続補正12】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0052

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0052】

具体的には、試料の数がS個である場合、多変量解析部18は、S個のスペクトログラムの各データをベクトル形式（ $s \_ m \_ n$ ）で表現し、そのベクトル形式で表現されたデータセットに対して主成分分析を実行する。上述したように、時間mは、スペクトログラムの横軸に対応し、周波数nは、スペクトログラムの縦軸に対応する。主成分分析によって得られる各主成分の個々のローディング値は、指數（ $m \times n$ ）により識別され、ベクトル形式で表現される。

【手続補正13】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0056

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0056】

分布生成部20は、多変量解析部18による主成分分析の結果として、指數列に対応する、各主成分のローディング値の分布を生成する。ここでは一例として、分布生成部20は、指數（ $m \times n$ ）の列に対応する、第1主成分（PC-1）のローディング値の分布を生成する。図8には、その分布50が示されている。横軸は指數（ $m \times n$ ）を示しており、縦軸は第1主成分（PC-1）のローディング値を示している。

【手続補正14】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0057

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0057】

プロット生成部22は、ローディング値の分布50から、時間軸と周波数軸とで規定される2次元グラフ上で色又は明るさによって第1主成分（PC-1）のローディング値の分布を表現するローディングプロットを生成する。図9には、そのローディングプロット52が示されている。プロット生成部22は、指數（ $m \times n$ ）の列に対応する、第1主成分（PC-1）のローディング値の分布50を、2次元グラフ上の分布に座標変換することで、ローディングプロット52を生成する。

【手続補正15】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0058

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0058】

ローディングプロット52において、横軸は時間を示しており、縦軸は周波数を示している。第1主成分（PC-1）のローディング値の大きさが、色又は明るさによって表現されている。ローディングプロット52における時間情報は、スペクトログラムにおける時間情報であり、ローディングプロット52における周波数情報は、スペクトログラムにおける周波数情報である。つまり、ローディングプロットが有する第2座標系は、スペクトログラムが有する第1座標系と同じである。

10

20

30

40

50

【手続補正 1 6】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0 0 6 5

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0 0 6 5】

例えば、2次元のスペクトログラムに対して主成分分析を実行する場合、多変量解析部18は、上記の変換に従って、各スペクトログラムを1次元データ（例えば、上述したベクトル形式で表現されるデータ）に変換し、試料数分の1次元データに対して主成分分析を実行する。分布生成部20は、試料ごとに、主成分分析の結果（1次元形式のデータ）に基づいて、ローディング値の分布を生成する。ローディング値の分布からローディングプロットを生成する場合、プロット生成部22は、上記の変換に従って、1次元データを2次元のローディングプロットに変換する。

10

20

30

40

50