

【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 2 年 5 月 28 日 (2020.5.28)

【公開番号】特開 2019-200211 (P2019-200211A)  
【公開日】令和 1 年 11 月 21 日 (2019.11.21)  
【年通号数】公開・登録公報 2019-047  
【出願番号】特願 2019-121958 (P2019-121958)  
【国際特許分類】

G 0 1 N 21/27 (2006.01)

G 0 1 J 3/44 (2006.01)

【F I】

G 0 1 N 21/27 Z

G 0 1 J 3/44

【手続補正書】

【提出日】令和 2 年 4 月 6 日 (2020.4.6)

【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

【補正の内容】

【特許請求の範囲】

【請求項 1】

第 1 の領域内の試料から計測された第 1 のスペクトルを含む第 1 のデータに対する第 1 の多変量解析の結果に基づいて、前記第 1 のデータに含まれる前記第 1 のスペクトルを複数のグループに分けるグループ設定部と、

前記グループ設定部によって分けられた前記複数のグループから、前記第 1 のデータよりもサイズが小さい抽出データを生成する抽出データ生成部と、

前記抽出データ生成部によって生成された前記抽出データに対して、主成分分析及び独立成分分析を順に行う第 2 の多変量解析の結果に基づいて、第 1 の基底ベクトルを取得する基底ベクトル取得部と、

前記第 1 の領域よりも計測点数が多い第 2 の領域内の前記試料から計測された第 2 のスペクトルを含む第 2 のデータと、前記基底ベクトル取得部により得られた第 1 の基底ベクトルと、に基づいて、前記第 2 のデータの独立成分スコアを取得する分析部と、

を有するデータ処理装置。

【請求項 2】

前記基底ベクトル取得部によって取得した前記第 1 の基底ベクトルを用いて、前記データに含まれる複数のスペクトルを、前記第 1 の基底ベクトルの成分にそれぞれ帰属し、前記第 1 の基底ベクトルの成分の分布を示す画像データを生成することを特徴とする請求項 1 に記載のデータ処理装置。

【請求項 3】

前記第 1 の多変量解析が、前記第 2 の多変量解析よりも単位データ量あたりの計算量が少ない多変量解析であることを特徴とする請求項 2 に記載のデータ処理装置。

【請求項 4】

前記画像データが、複数の前記スペクトルと、前記第 1 の基底ベクトルと、の内積であるスコア値の二次元的又は三次元的な強度分布データであることを特徴とする請求項 2 に記載のデータ処理装置。

【請求項 5】

前記グループ設定部は、前記データに含まれる複数のスペクトルを、前記第 1 の多変量

解析の結果に基づいて得られた第 2 の基底ベクトルによって、前記複数のグループに分けることを特徴とする請求項 1 に記載のデータ処理装置。

【請求項 6】

前記グループ設定部は、前記データに含まれる複数のスペクトルと、前記第 1 の多変量解析の結果に基づいて得られた第 2 の基底ベクトルと、から得られたスコア値に基づいて、前記データに含まれる複数のスペクトルを前記複数のグループに分けることを特徴とする請求項 1 に記載のデータ処理装置。

【請求項 7】

前記第 1 の多変量解析が、主成分分析を含むことを特徴とする請求項 1 乃至請求項 6 のいずれか一項に記載のデータ処理装置。

【請求項 8】

前記スペクトルが、紫外又は可視又は赤外域の分光スペクトル、ラマン分光スペクトル、質量スペクトルのいずれか 1 つを含むことを特徴とする請求項 1 乃至請求項 7 のいずれか一項に記載のデータ処理装置。

【請求項 9】

前記データが、X Y 平面上の各点に対応して前記スペクトルが格納されたデータであることを特徴とする請求項 1 乃至請求項 8 のいずれか一項に記載のデータ処理装置。

【請求項 10】

請求項 2 乃至請求項 4 のいずれか一項に記載のデータ処理装置と、  
前記画像データを画像表示する画像表示部と、  
を有することを特徴とするデータ表示システム。

【請求項 11】

請求項 1 乃至請求項 9 のいずれか一項に記載のデータ処理装置と、  
前記データ処理装置によって処理される前記第 1 のデータと、前記第 2 のデータと、を前記試料から取得する計測部と、  
を有することを特徴とする試料データ取得システム。

【請求項 12】

前記抽出データ生成部は、前記グループ設定部によって分けられた前記複数のグループのそれぞれから少なくとも一つずつスペクトルを抽出して、複数のスペクトルが含まれる抽出データを生成し、

前記基底ベクトル取得部によって取得した前記第 1 の基底ベクトルを用いて、前記第 2 のデータに含まれる複数のスペクトルを、前記第 1 の基底ベクトルの成分にそれぞれ帰属し、前記第 1 の基底ベクトルの成分の分布を示す画像データを生成することを特徴とする請求項 11 に記載の試料データ取得システム。

【請求項 13】

前記第 2 のデータに含まれるスペクトルの次元数が、前記第 1 のデータに含まれるスペクトルの次元数よりも低いことを特徴とする請求項 12 に記載のデータ取得システム。

【請求項 14】

前記グループ設定部は、前記データに含まれる複数のスペクトルを、前記第 1 の多変量解析の結果に基づいて得られた第 2 の基底ベクトルによって、前記複数のグループに分けることを特徴とする請求項 12 又は請求項 13 に記載のデータ取得システム。

【請求項 15】

前記グループ設定部は、前記データに含まれる複数のスペクトルと、前記第 1 の多変量解析の結果に基づいて得られた第 2 の基底ベクトルと、から得られたスコア値に基づいて、前記データに含まれる複数のスペクトルを前記複数のグループに分けることを特徴とする請求項 12 又は請求項 13 に記載のデータ取得システム。

【請求項 16】

前記第 1 の多変量解析が、主成分分析を含むことを特徴とする請求項 12 乃至請求項 15 のいずれか一項に記載のデータ取得システム。

【請求項 17】

データに含まれる複数のスペクトルを、前記複数のスペクトルに対する第 1 の多変量解析の結果に基づいて、複数のグループに分けるグループ設定ステップと、

前記グループ設定ステップによって分けられた前記複数のグループのそれぞれから少なくとも一つずつスペクトルを抽出して、複数のスペクトルが含まれる抽出データを生成する抽出データ生成ステップと、

前記抽出データ生成ステップによって生成された前記抽出データに対して主成分分析及び独立成分分析を順に行う第 2 の多変量解析の結果に基づいて第 1 の基底ベクトルを取得する基底ベクトル取得ステップと、  
を有することを特徴とするデータ処理方法。

【請求項 18】

前記グループ設定部は、前記データに含まれる複数のスペクトルを、前記第 1 の多変量解析の結果に基づいて得られた第 2 の基底ベクトルによって、前記複数のグループに分けることを特徴とする請求項 17 に記載のデータ処理方法。

【請求項 19】

前記グループ設定部は、前記データに含まれる複数のスペクトルと、前記第 1 の多変量解析の結果に基づいて得られた第 2 の基底ベクトルと、から得られたスコア値に基づいて、前記データに含まれる複数のスペクトルを前記複数のグループに分けることを特徴とする請求項 17 に記載のデータ処理方法。

【請求項 20】

前記第 1 の多変量解析が、主成分分析を含むことを特徴とする請求項 17 乃至請求項 19 のいずれか一項に記載のデータ処理方法。

【請求項 21】

コンピュータに、

第 1 の領域内の試料から計測された第 1 のスペクトルを含む第 1 のデータに対する第 1 の多変量解析の結果に基づいて、前記第 1 のデータに含まれる前記第 1 のスペクトルを複数のグループに分けるグループ設定ステップと、

前記グループ設定ステップによって分けられた前記複数のグループから、前記第 1 のデータよりもサイズが小さい抽出データを生成する抽出データ生成ステップと、

前記抽出データ生成ステップによって生成された前記抽出データに対して、主成分分析及び独立成分分析を順に行う第 2 の多変量解析の結果に基づいて、第 1 の基底ベクトルを取得する基底ベクトル取得ステップと、

前記第 1 の領域よりも計測点数が多い第 2 の領域内の前記試料から計測された第 2 のスペクトルを含む第 2 のデータと、前記基底ベクトル取得部により得られた第 1 の基底ベクトルと、に基づいて、前記第 2 のデータの独立成分スコアを取得する分析ステップと、  
を実行させるためのプログラム。

【請求項 22】

前記グループ設定ステップは、前記データに含まれる複数のスペクトルを、前記第 1 の多変量解析の結果に基づいて得られた第 2 の基底ベクトルによって、前記複数のグループに分けることを特徴とする請求項 21 に記載のプログラム。

【請求項 23】

前記グループ設定ステップは、前記データに含まれる複数のスペクトルと、前記第 1 の多変量解析の結果に基づいて得られた第 2 の基底ベクトルと、から得られたスコア値に基づいて、前記データに含まれる複数のスペクトルを前記複数のグループに分けることを特徴とする請求項 21 に記載のプログラム。

【請求項 24】

前記第 1 の多変量解析が、主成分分析を含むことを特徴とする請求項 21 乃至請求項 23 のいずれか一項に記載のプログラム。

【請求項 25】

コンピュータに、

第 1 の領域内の試料から計測された第 1 のスペクトルを含む第 1 のデータに対する第 1

の多変量解析の結果に基づいて、前記第 1 のデータに含まれる前記第 1 のスペクトルを複数のグループに分けるグループ設定ステップと、

前記グループ設定ステップによって分けられた前記複数のグループから、前記第 1 のデータよりもサイズが小さい抽出データを生成する抽出データ生成ステップと、

前記抽出データ生成ステップによって生成された前記抽出データに対して、主成分分析及び独立成分分析を順に行う第 2 の多変量解析の結果に基づいて、第 1 の基底ベクトルを取得する基底ベクトル取得ステップと、

前記第 1 の領域よりも計測点数が多い第 2 の領域内の前記試料から計測された第 2 のスペクトルを含む第 2 のデータと、前記基底ベクトル取得部により得られた第 1 の基底ベクトルと、に基づいて、前記第 2 のデータの独立成分スコアを取得する分析ステップと、  
を実行させるためのプログラムを記憶したコンピュータ読み取り可能な記憶媒体。

【請求項 26】

前記グループ設定ステップは、前記データに含まれる複数のスペクトルを、前記第 1 の多変量解析の結果に基づいて得られた第 2 の基底ベクトルによって、前記複数のグループに分けることを特徴とする請求項 25 に記載の記憶媒体。

【請求項 27】

前記グループ設定ステップは、前記データに含まれる複数のスペクトルと、前記第 1 の多変量解析の結果に基づいて得られた第 2 の基底ベクトルと、から得られたスコア値に基づいて、前記データに含まれる複数のスペクトルを前記複数のグループに分けることを特徴とする請求項 25 に記載の記憶媒体。

【請求項 28】

前記第 1 の多変量解析が、主成分分析を含むことを特徴とする請求項 25 乃至請求項 27 のいずれか一項に記載の記憶媒体。

【手続補正 2】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0011

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0011】

本発明の一側面としてのデータ処理装置は、第 1 の領域内の試料から計測された第 1 のスペクトルを含む第 1 のデータ前記複数のスペクトルに対する第 1 の多変量解析の結果に基づいて、前記第 1 のデータに含まれる前記第 1 のスペクトルを複数のグループに分けるグループ設定部と、前記グループ設定部によって分けられた前記複数のグループから、前記第 1 のデータよりもサイズが小さい抽出データを生成する抽出データ生成部と、前記抽出データ生成部によって生成された前記抽出データに対して、主成分分析及び独立成分分析を順に行う第 2 の多変量解析の結果に基づいて、第 1 の基底ベクトルを取得する基底ベクトル取得部と、前記第 1 の領域よりも計測点数が多い第 2 の領域内の前記試料から計測された第 2 のスペクトルを含む第 2 のデータと、前記基底ベクトル取得部により得られた第 1 の基底ベクトルと、に基づいて、前記第 2 のデータの独立成分スコアを取得する分析部と、を有することを特徴とする。