

[ケモメトリクス] 混合植物油脂の混合比推定

【はじめに】

分子イオンスペクトルを得ることができる IAMSでは、測定者はマススペクトルパターンの違いから比較的容易に異同識別を行うことができますが、主成分分析 (PCA)やクラスター分析等の多変量解析技術を用いることでさらに識別精度を向上させることが可能で、目視では判別し難い試料であっても識別することが可能となります。また、このような解析技術の適用はユーザーの恣意的な判断を排除し、客観的なデータ解析を可能とします。

アプリケーションノート No.Q003Cでは、改重回帰分析 (DCR)を用いることでPCAやクラスター分析では不可能であった混合植物油脂の油種推定が可能となる例を示しましたが、ここではさらに進めて、混合油種の混合比推定を行なった例を示します。

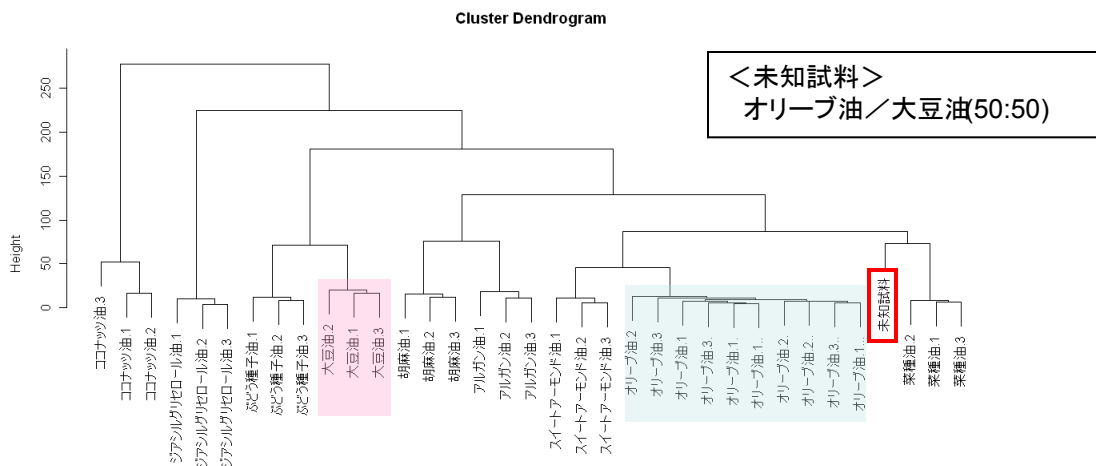


図1 混合植物油脂のクラスター分析結果

【解析手順】

解析に使用するデータはアプリケーションシート No.Q001に記載の測定条件で、各植物油脂の測定を行いました。植物油脂のデータベースとしては、アプリケーションシート No.Q002Cと同様のものを用いています。

解析に際しては、各植物油脂・混合油脂のマススペクトル毎に最大値を 1として規格化を行なうことで、異なる測定日の感度変化の影響を除外しています。ノイズ除去等の他の前処理は行なわず、0分から約8分30秒までの領域の平均マススペクトルデータ (m/z:250~1,000)を解析に使用しました。なお、本アプリケーションシートの例では、データ再現性を向上させるために解析に使用する質量範囲を No.Q002CやNo.Q003Cから変更していますが、相互に比較するデータの解析処理を行なうときには測定条件・解析条件を同一にすることが必要となります。

植物油脂データベース

照合

未知試料

補正係数算出

既知試料

ココナッツ油と他の植物油の50:50混合油8種

追加

オリーブ油
胡麻油
大豆油
菜種油
ぶどう種子油
ジアシルグリセロール油
スイートアーモンド油
アルガン油
ココナッツ油

混合油1 / オリーブ油:スイートアーモンド油(50:50)
混合油2 / オリーブ油:スイートアーモンド油(20:80)
混合油3 / オリーブ油:スイートアーモンド油(5:95)
混合油4 / オリーブ油:大豆油(50:50)
混合油5 / オリーブ油:大豆油(20:80)
混合油6 / オリーブ油:大豆油(5:95)
混合油7 / オリーブ油:胡麻油(50:50)
混合油8 / オリーブ油:胡麻油(20:80)
混合油9 / オリーブ油:胡麻油(5:95)

表1 混合植物油脂のDCR解析結果(感度補正なし)

混合比	オリーブ油／大豆油			オリーブ油／胡麻油			オリーブ油／スイートアーモンド油			
	50/50	20/80	5/95	50/50	20/80	5/95	50/50	20/80	5/95	
データベース	オリーブ油	64.1%	30.5%	7.9%	65.1%	30.6%	3.1%	49.1%	18.3%	5.3%
	胡麻油	-	-	-	31.4%	69.4%	93.1%	-	-	-
	スイートアーモンド油	2.4%	1.5%	-	-	-	1.4%	50.9%	80.1%	94.7%
	大豆油	31.2%	65.3%	92.1%	-	-	-	-	-	-
	ぶどう種子油	-	1.0%	-	-	-	-	-	-	-
	菜種油	-	-	-	3.5%	-	-	-	1.6%	-
	アルガン油	2.2%	1.6%	-	-	-	2.4%	-	-	-
	ジアシルグリセロール油	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	ココナッツ油	-	-	-	-	-	-	-	-	-
重相関R	0.9998	0.9989	0.9998	0.9998	0.9997	0.9995	0.9998	0.9996	0.9984	
重決定R2	0.9996	0.9977	0.9996	0.9996	0.9995	0.9991	0.9996	0.9992	0.9969	



表2 混合植物油脂のDCR解析結果(感度補正あり)

混合比	オリーブ油／大豆油			オリーブ油／胡麻油			オリーブ油／スイートアーモンド油			
	50/50	20/80	5/95	50/50	20/80	5/95	50/50	20/80	5/95	
データベース	オリーブ油	47.2%	17.4%	4.0%	48.3%	17.6%	2.2%	50.2%	19.4%	5.9%
	胡麻油	-	-	-	48.1%	82.4%	95.6%	-	-	-
	スイートアーモンド油	1.8%	1.3%	-	-	-	<1.0%	49.8%	78.2%	94.1%
	大豆油	46.9%	78.7%	96.0%	-	-	-	-	-	-
	ぶどう種子油	-	<1.0%	-	-	-	-	-	-	-
	菜種油	-	-	-	3.6%	-	-	-	2.4%	-
	アルガン油	4.1%	2.7%	-	-	-	2.2%	-	-	-
	ジアシルグリセロール油	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	ココナッツ油	-	-	-	-	-	-	-	-	-

【解析結果】

DCRによる解析で、感度補正を行わない場合 (アプリケーションノートNo.Q003Cと同等)と、感度補正を行なった場合の結果を表にまとめています。

数%の微量成分が残りますが、概ね 5%以上の含有成分については±数%以内の誤差で、その混合比を推定することができました。 事前に構築したデータベースから DCRを行なう場合、マトリックス中の微量成分を直接評価することは困難ですが、マトリックスの同定・識別を行なうには有益な解析法になると考えられます。

No.	植物油	強度値
1	オリーブ油	0.867645
2	大豆油	0.414573
3	菜種油	0.599201
4	胡麻油	0.429879
5	スイートアーモンド油	0.865749
6	ぶどう種子油	0.597401
7	アルガン油	0.338745
8	ジアシルグリセロール油	1.941915