

## ノート

## 主成分分析による天然材料(亜麻・苧麻)鑑別と依頼事業への応用

宇井 剛\*<sup>1)</sup>

## Natural material (Linen/Ramie) discrimination by Principal Component Analysis, and application to a requested examination

Tsuyoshi Ui\*<sup>1)</sup>

キーワード：主成分分析，天然材料，亜麻，苧麻

Keywords：Principal component analysis, Natural material, Linen, Ramie

## 1. はじめに

天然材料は、再生可能なカーボンニュートラルな材料として期待されている。しかし天然材料の品質を保証するために必要な素材の鑑別は、長年の経験と熟練が必要であり、習熟者の不足ともに時間とコストがかかる傾向にある。

本件では亜麻・苧麻を試料として用い、熟練を要しないで客観的に短時間で天然材料を鑑別する方法として、主成分分析による鑑別を試みた。亜麻と苧麻は、IRのチャートを比較してもほとんど区別はできない程違いを表す情報量は少ない。そこで、外的要因の有る回帰分析(定量的)の前段階として、外的要因の無い主成分分析(PCA)とFT-IRを利用した、天然材料の鑑別を検討した。そして城東支所は新規事業として、計量化学(ケモメトリックス)の依頼事業化についても検討してきたので、本件の成果の依頼試験事業への応用について検討した。

## 2. 試験

## 2.1 試験条件

## (1) 試験試料

試験試料は亜麻2試料(25/2(織度/撚り本数)を2種類)、苧麻2試料(15/5, 20/2)の4試料を用いた。天然材料は入手したままでは夾雑物が多いため、以下の条件でソーピングした後、標準試料とした。

## ・ソーピング条件

ソーピング剤(非イオン)：

ポリオキシアルキレンアルキルエーテル 1g/L

浴比：1:30 温度：60℃ 時間：20分

後処理：温水洗(40℃：10分)

→温水洗(40℃：10分)→冷水洗(10分)

## (2) FT-IR 測定条件

光源：標準光源

検出器：TGS

分解：4cm<sup>-1</sup>

測定範囲：400～4000cm<sup>-1</sup>

データ間隔：0.964233 cm<sup>-1</sup> データ数：3736

機種：日本分光株式会社 FT/IR-6100typeA

## 2.2 解析条件

## (1) 解析ソフト

・Spectra Manager Version 2 PCA モデル作成/予測プログラム Ver.2.02A (日本分光株式会社)

## (2) 解析波長範囲の選定

天然材料は吸水性が良く湿度等の影響を受けやすい、そして比較的多くのFT-IRが安定して多くの情報を得られる事を考慮して、800cm<sup>-1</sup>～1800cm<sup>-1</sup>の範囲を検討した。

## (3) 試料の測定及び解析方法

試料はKB r錠剤法で10回測定したスペクトルを用いた。スペクトルの前処理として、解析波長範囲の最大吸光度を1として各データを補正した後透過率に戻し、差分法による1次微分処理をおこなった。そして亜麻・苧麻それぞれを同一グループとして合わせ、主成分数(P.C.)を9として主成分分析をおこなった。主成分分析は亜麻・苧麻の微小な測定結果の違いを、定性的に抽出するために用いた。

## 2.3 測定結果

## (1) 標準試料の解析波長範囲の決定及び解析結果

標準試料を測定して主成分分析をおこなった。その結果、850cm<sup>-1</sup>～1150 cm<sup>-1</sup>の範囲で主成分数を3まで用いると、P.C.1, P.C.2, P.C.3, 共にスコアが高く、この波長範囲が解析に適している事がわかった。この時亜麻・苧麻の差は、P.C.2・P.C.3で説明され鑑別する事ができた。しかし寄与率はそれぞれ0.32%・0.15%で、非常に少ない情報量である事が確認できた。主成分グラフと標準試料P.C.2, P.C.3のスコア・寄与率を図1に記す。

## (2) 精練試料の解析結果

天然材料は多くの夾雑物を含んでいる。本研の亜麻・苧麻も油脂・膠質物等を含んでおり、これらの性質に差がある事<sup>(1)</sup>が知られている。亜麻・苧麻がFT-IRとPCAによって判別されるのは、夾雑物による影響が大きい事は容易に想像され

る。しかし天然材料は目的によって、異なった精練条件で精練がおこなわれる。そこで実際に亜麻・苧麻を取り扱っている企業・組合に精練条件について聞き取り調査をおこなった。その結果、通常一番多くおこなわれている精練条件を条件1、品質を損なわない上限の精練条件を条件2とした。そして標準試料をこの2条件で精練をおこない、PCAに対する精練の影響を確認した。

- ・条件1 NaOH : 4g/L 時間 : 30分
  - ・条件2 " : 6g/L " : 60分
- 他の同一条件を以下に記す。

温度 : 95°C以上 浴比 1 : 30  
 精練剤 (非イオン) : ポリオキシアルキルエーテル 1g/L  
 後処理 : 温水洗 (60°C : 10分) → 酢酸処理 (1g/L : 20分)  
 → 湯洗 (40°C : 10分) → 水洗 (10分)

図2に a) 条件1, のP.C.2, P.C.3, b) 条件2, のP.C.1, P.C.2のスコア・寄与率を記す。

標準試料では、亜麻・苧麻の差はP.C.2, P.C.3に現れたが、条件1ではP.C.1, ~P.C.3で差を説明できず鑑別できなかった。しかし条件2ではP.C.1で差が説明され鑑別する事ができた。精練によって夾雑物の組成割合が変化して、精練の強さによって異なった各主成分が現れたと考えられる。

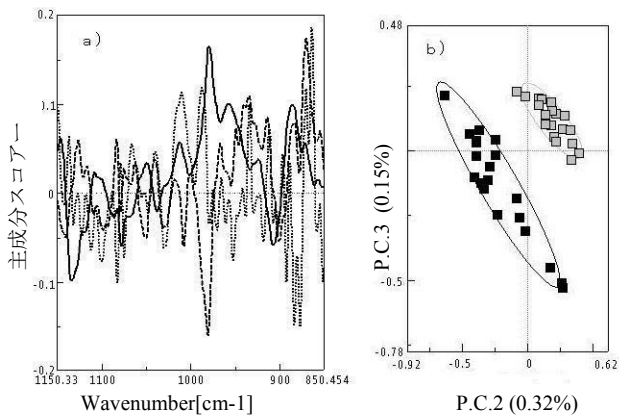


図1. 標準試料主成分分析結果 : a) 波長範囲850cm<sup>-1</sup>~1150cm<sup>-1</sup>の主成分グラフ, — P.C.1, - - - P.C.2, ··· P.C.3, b) P.C.1, P.C.3(寄与率)のスコア, ■ : 亜麻 □ : 苧麻

(3) 解析波長範囲を変え条件1試料の再解析

条件1では、標準試料を元に求めた解析波長範囲では、亜麻・苧麻の鑑別をする事ができなかったが、夾雑物は条件2より多く残っていると考えられる。そこで解析波長範囲を選定し直して鑑別を試みた。その結果波長範囲 970cm<sup>-1</sup>~990cm<sup>-1</sup>において、P.C.1,P.C.3を用いると鑑別する事ができた。

P.C.1の寄与率は99.1%と情報量が高い。しかし選別した波長範囲が狭いため、スコアの値が極めて狭く精度が低くなると考えられる。図3に波長範囲970cm<sup>-1</sup>~990cm<sup>-1</sup>のP.C.1, P.C.3のスコア・寄与率を記す。

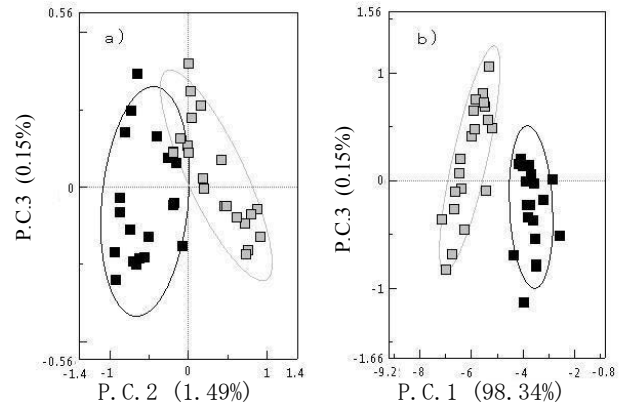


図2. 精練条件1,2の(寄与率)のスコア : a)条件1, b)条件2, ■ : 亜麻 □ : 苧麻

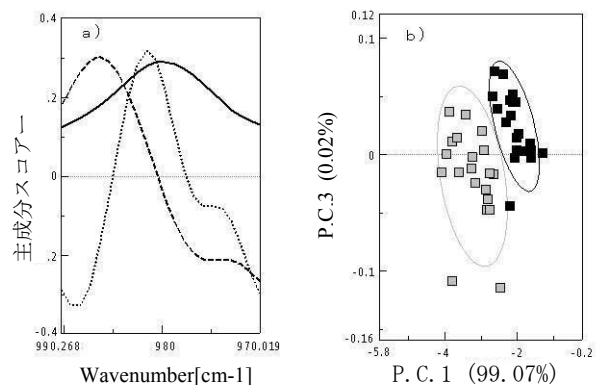


図3. 条件1試料再解析結果 : a) 波長範囲970cm<sup>-1</sup>~990cm<sup>-1</sup>の主成分グラフ, — P.C.1, - - - P.C.2, ··· P.C.3, b) P.C.1, P.C.3(寄与率)のスコア, ■ : 亜麻 □ : 苧麻

3. まとめ

- 天然材料 (本件の亜麻等) の判別をPCAで行った場合、
  - ・従来IRでは鑑別が困難と言われていたセルロース系天然材料 (本研究では亜麻・苧麻) を鑑別する事ができた。
  - ・主成分分析は精練条件により大きな影響を受けると共に、精練条件の違いも検出できる可能性が示唆された。
  - ・解析条件を精査することにより、種々の鑑別に柔軟に対応でき、外的要因のあるPLS利用の可能性が示された。
- 以上の事をふまえて主成分分析を用いた依頼事業として以下の2点が考えられる。
- ・工場、事業所等各企業が通常受け入れている天然材料を母集団としたデータベースの構築。
  - ・このデータベースを元にした、受け入れ天然材料の品質のスクリーニング。

(平成24年5月18日受付, 平成24年8月21日再受付)

文 献

- (1) 日本学術振興会染色加工第120委員会 : 新染色加工講座 (5) 精練・漂白, 共立出版株式会社, pp.79-83, (1972)