

PLS法によるよう素価の定量

Analysis of Iodine Value with PLS method

よう素価の異なる22種類の食用油脂を測定し、PLS法を用いて定量計算を行ないました。定量計算はピークの飽和していない9000～5860 cm^{-1} と5750～4500 cm^{-1} の範囲を用いて行ないました。定量結果をTable2に示します。また、この結果の真値（入力値）と予測値（計算結果）とのプロットをFig.4に示します。よう素価52.0から133.4の範囲で良好な結果が得られていることが分かります。

今回は、近赤外分光分析法とPLS法による定量分析の一例として、油脂のよう素価測定についてご紹介しました。近赤外分光法とPLS法の組み合わせによる分析はこれ以外にも多成分同時定量など、その応用範囲は今後も広がっていくと考えられます。

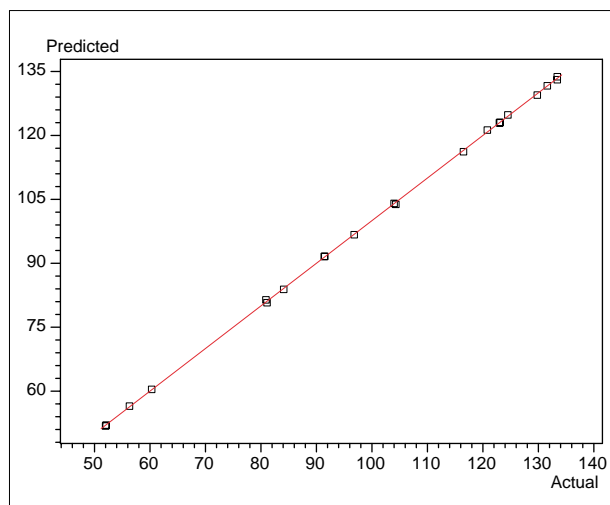


Fig.4 よう素価の真値と予測値の関係
Relationship between actual and predicted Iodine Value

Table 2 PLS定量計算結果
Result of quantitative calculation by PLS

参照スペクトル	真値	予測値	差(%)	濃度残差	スペクトル残差
1 ¥ 1	123	122.96	0.032	0.04	0.033
2 ¥ 2	124.5	124.818	-0.256	-0.318	0.034
3 ¥ 3	104	104.058	-0.055	-0.058	0.076
4 ¥ 4	104.3	103.827	0.454	0.473	0.085
5 ¥ 5	116.5	116.186	0.27	0.314	0.116
7 ¥ 7	91.5	91.618	-0.129	-0.118	0.057
8 ¥ 8	91.4	91.597	-0.215	-0.197	0.12
9 ¥ 9	129.8	129.468	0.256	0.332	0.035
12 ¥ 12	96.8	96.707	0.096	0.093	0.072
13 ¥ 13	120.8	121.265	-0.385	-0.465	0.072
14 ¥ 14	123	123.039	-0.032	-0.039	0.062
15 ¥ 15	131.6	131.652	-0.04	-0.052	0.036
16 ¥ 16	123.1	123.032	0.056	0.068	0.047
17 ¥ 17	133.4	133.083	0.237	0.317	0.039
18 ¥ 18	133.4	133.766	-0.275	-0.366	0.035
19 ¥ 19	60.3	60.411	-0.184	-0.111	0.028
21 ¥ 21	56.3	56.489	-0.335	-0.189	0.014
22 ¥ 22	52.1	52.047	0.101	0.053	0.02
23 ¥ 23	52	51.822	0.343	0.178	0.023
24 ¥ 24	81.1	80.758	0.422	0.342	0.022
25 ¥ 25	84.1	83.883	0.258	0.217	0.048
26 ¥ 26	80.9	81.415	-0.637	-0.515	0.047

PLS検量法のレポート

検量線テーブル：
アルゴリズム：
成分数：
参照の数：
範囲 [1]：
範囲 [2]：
前処理：

検量線テーブル
PLS I
1
22
5860.00 - 9000.00
4500.00 - 5750.00

PLS 検量法
ベースライン：オートゼロ

センタリングされたデータ：あり
成分：成分 1
ファクタの個数：6
相関係数：0.99995
MSEP：0.00009
SEP：0.00961
Xレバレッジ警告：0
Y 残差警告：0

 島津製作所 分析計測事業部
応用技術部

島津分析コールセンター

●東京 ☎(03)3219-1691
●京都 ☎(075)813-1691

<http://www.an.shimadzu.co.jp>

会員情報提供サービス「Shim-Solutions Club」にご登録下さい。
<http://solutions.shimadzu.co.jp/>
いろいろな情報提供サービスが受けられます。

3100-07501-11A-IK
2005.7