The Japan Society for Analytical Chemistry

報　文

多変量解析法を用いたパイログラムからのポリエチレンとポリプロピレン混合組成比の推定

三井　利幸®，肥田　宗政*，藤村　義和**

（1989年2月1日受理）

ポリエチレンとポリプロピレンの混合物について熱分解ガスクロマトグラフィー（PyGC）を行い，得られたパイログラムから27の特定ピークを選択し，それぞれのピーク面積比を一定の規則に従って自然数化後，多変量解析法により混合比を推定した．方法は，混合比の明らかな19試料についてPyGCで測定し，得られたパイログラムからデータベースを作成し，コンピューターにファイルする．同一条件で混合比の不明確な試料（検査試料）を測定し，データベースと同様な方法で自然数化後，データベースと共に多変量解析法（クラスター分析，主成分分析，数量化理論第IV類）により混合比を計算した．その結果本方法で混合比を推定することが可能であった．

1　緒　　言

熱分解ガスクロマトグラフィー（PyGC）は高分子化合物の同定にも有効な方法である．しかし，最近では2種類以上の高分子化合物をあらかじめ任意の割合に溶融混合し，ポリマーアロイとして市販された高分子化合物を用いた製品が販売[1]されている．そのために，これらの分析方法として高分解能PyGCにより特徴的なピークを完全に分離後，相対的強度から組成を決定する方法[2)~4)]が検討されている．しかし，一般的に行われている従来からのパターン認識法[5)]では，混合比が異なるとパイログラムが変化し，物質の同定が困難となる場合がある．

そこでまず，混合されている高分子化合物が明らかで，混合比の不明な試料（検査試料）の混合比（w/w）をPyGC測定結果からパーソナルコンピューターを用い，多変量解析法で求める方法を検討した．今回は，ポリエチレン（PE）とポリプロピレン（PP）の混合物で混合比の明らかな19種類についてPyGCを行い，得られた結果を一定の規則に従って数値化後，データベースとしてコンピューターにファイルした．次いで検査試料についてもデータベース作成と同一条件で測定及び数値化を行い，両者を合わせたものについて多変量解析法で計算し，検査試料の混合比を推定した．

2　熱分解GC測定

データベースを作成するためのPE，PPの混合物は，PE，PPを合わせて約50 gとなるように測りとり溶融後，激しくかき混ぜながら冷却し作製した．このようにして作製したPE：PPの混合比が0：100，1：20，1：10，1：8，1：6，1：5，1：4，1：3，1：2，1：1，2：1，3：1，4：1，5：1，6：1，8：1，10：1，20：1，100：0の19種類について，Table 1の条件でPyGCを行っ

Table 1　Analytical conditions

Pyrolyzer	Japan Analytical Co., JHP-2 type Curie-point pyrolyzer
Oven temp.	150°C
Pipe temp.	210°C
Pyrolysis temp.	670°C (4 s)
Gas chromatograph	Hitachi 163 type
Column	10% PEG 20M Chromosorb W (AW-DMCS) 3 mm i.d.×2 m
Column temp.	50～150°C (5°C/min)
Carrier gas	N_2 (25 ml/min)
Detector	FID Att 1×10^2
Sample weight	2 mg

*　愛知県科学捜査研究所：460　愛知県名古屋市中区三の丸2-1-1
**　中部大学工学部工業科学科：487　愛知県春日井市松本町1200

NII-Electronic Library Service

The Japan Society for Analytical Chemistry

た．次いで Fig. 1 に示したように，得られた各パイログラム中の 27 のピーク面積を測定した．検査試料についても，試料作製及び PyGC の測定条件はデータベース作製と同一方法で行った．

3 データベースの作成

データベース作製のために，混合比の明らかな 19 種類について，パイログラム上に認められたすべてのピークを対象として，後で述べる数量化理論第 IV 類とクラスター分析で計算を行った．まず一つのピーク面積でそれ以外のピーク面積を割り，得られた数値を Table 2 に従って自然数化する．この数値を用いて数量化理論第 IV 類から互いに相関関係のないピークを排除し，次いで全体のピークの面積を割っていく特定のピーク（基本ピーク）面積の選択を，クラスター分析のクラスター距離から抽出した．その結果，今回用いた 27 のピークと六つの基本ピークが抽出された．抽出された 27 のピークを Fig. 1 に示す．Fig. 1 に示した R_t を持つ 27 ピークの面積を，PE : PP の混合比の異なる 19 種類すべてについて，式(1)に従って各基本ピークに対する各ピークの面積比 Z_{ij}（$i=3, 5, 8, 11, 12, 13$ のピーク，$j=1, 2, 3, \cdots$，27 のうち基本ピークを除いた 26 ピーク）を計算した．

$$Z_{ij}=P_{ij}/P_i \quad \cdots\cdots(1)$$

ここで P_i は基本ピーク $i=3, 5, 8, 11, 12, 13$ の面積，P_{ij} は 27 ピークから基本ピークを除いた 26 のピーク面積である．計算の結果から得られた Z_{ij} を Table 2 の方法で規格化して自然数化する．このようにして行列（19×26）が，各基本ピーク ごとに計 6 組得られる．一例として Table 3 に基本ピーク 5 から得られた行列を示す．このようにな行列 6 組をデータベースとしてファイルする．検査試料についても，データベース作成の場合と同様な方法で自然数化する．多変量解析法による計算は，各々の基本ピークから得られたデータベースに，データベースと同じ基本ピークから得られた検査試料の自然数化した結果を加えた行列（20×26）で行った．

実際の操作は，検査試料をパイロホイルに装てんし PyGC を行うだけで，その後の処理はすべてパーソナルコンピューターが自動的に行うようにプログラム化した．

Table 2 Normarization of peak area ratio

Each peak area/ Specific peak area	Normarized data
0～ 0.05	1
0.06～ 0.50	2
0.60～ 1.00	3
1.10～ 2.00	4
2.10～ 3.00	5
3.10～ 5.00	6
5.10～10.00	7
10.10～	8

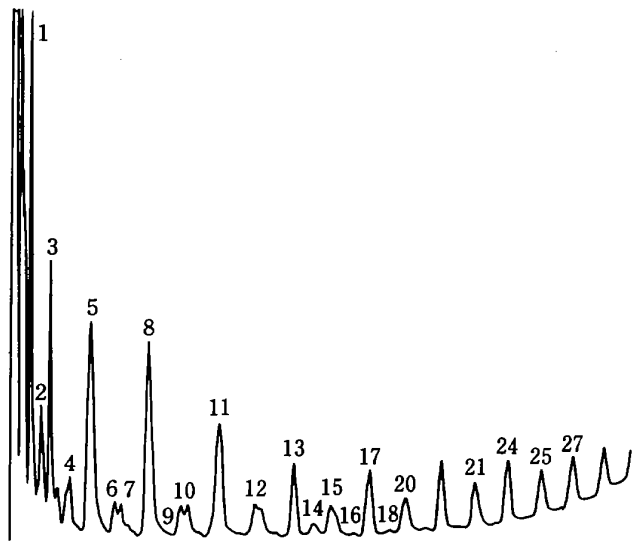

Fig. 1 Pyrogram of polyethylene-polypropylene mixture

4 多変量解析法

今回は多変量解析法の中で検査試料の混合比を推定するのに都合のよい，クラスター分析，数量化理論第 IV 類及び主成分分析を用いて計算を行った．

4・1 クラスター分析

クラスター分析は，クラスターに属するすべての点の，クラスター平均値からの偏差平方和の増加量の最小な二つのクラスターを結合させていき分類する手法であるウォード法[6]で行った．計算は上記の方法で作成した各基本ピークごとのデータベースに同じ基本ピークから計算した検査試料（多変量解析法説明のための検査試料は混合比 PE : PP＝1 : 1 のものを使用した）のデータを加えた．行列（20×26）のものについてクラスター分析を行った．その結果，各基本ピークに対するクラスター距離とデンドログラムが得られた．一例として，Fig. 2 に基本ピーク 5 から得られたデンドログラムを示した．この結果では，検査試料（No. 20）は PE :

NII-Electronic Library Service

The Japan Society for Analytical Chemistry

Table 3　Example of filed data

Sample number	Peak number																								
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26
1	3	5	4	7	1	2	3	2	3	3	3	2	2	3	2	1	1	3	1	1	2	2	2	1	3	1
2	4	5	4	7	2	2	2	2	3	3	3	2	2	3	2	1	1	2	2	1	2	2	2	1	3	1
3	4	5	4	7	2	2	3	2	3	4	3	2	2	3	2	2	1	2	2	1	1	2	2	1	2	1
4	4	5	4	7	2	2	4	2	3	4	3	2	2	3	3	2	1	2	2	2	2	2	2	1	2	1
5	4	5	4	7	2	2	4	2	3	4	3	2	2	3	2	2	1	2	2	2	2	2	2	2	2	1
6	4	5	4	7	2	2	2	2	3	3	3	2	2	3	2	2	1	2	2	2	2	2	2	1	2	1
7	4	5	4	7	2	2	3	2	3	3	3	2	2	3	2	2	1	2	2	2	2	2	2	1	2	1
8	4	5	4	7	2	3	3	2	4	3	3	2	2	3	3	2	1	2	2	2	2	2	2	1	2	1
9	4	5	4	7	2	3	3	2	3	3	3	2	2	3	2	2	2	2	2	2	2	2	2	1	2	1
10	6	4	5	3	2	3	3	1	3	3	4	2	2	3	2	2	2	1	2	2	2	2	2	1	2	1
11	6	4	5	2	2	3	6	1	3	5	4	4	2	3	2	4	2	1	4	4	1	1	4	3	1	3
12	6	4	5	2	2	3	6	1	4	5	3	4	2	3	2	4	2	1	4	4	1	1	4	3	1	3
13	6	4	5	2	2	3	6	1	4	5	3	4	2	4	2	2	2	1	3	4	1	1	4	3	1	3
14	6	4	5	2	2	3	6	1	3	6	3	4	2	4	2	4	3	1	4	4	1	1	4	3	1	4
15	6	4	5	2	2	3	6	1	3	6	3	4	3	3	2	4	2	1	4	4	1	1	4	3	1	4
16	5	4	5	2	2	3	6	1	3	6	4	4	2	3	2	4	2	1	4	4	1	1	4	3	1	4
17	5	6	5	2	1	3	6	1	3	6	4	4	2	3	2	4	2	1	4	4	1	1	4	3	1	4
18	5	6	5	2	1	3	6	1	3	6	4	4	2	3	2	4	2	1	4	4	1	1	4	3	1	4
19	6	6	5	2	1	3	6	1	3	6	4	4	2	3	2	4	4	1	4	4	1	1	4	3	1	4
20	4	4	4	2	2	2	3	1	2	3	2	3	2	3	1	2	2	1	3	2	1	1	3	3	1	3

Sample number

No.1 ..... PP
No.2 ..... PE:PP=1:20
No.3 ..... PE:PP=1:10
No.4 ..... PE:PP=1:8
No.5 ..... PE:PP=1:6
No.6 ..... PE:PP=1:5
No.7 ..... PE:PP=1:4
No.8 ..... PE:PP=1:3
No.9 ..... PE:PP=1:2
No.10 .... PE:PP=1:1
No.11 .... PE:PP=2:1
No.12 .... PE:PP=3:1
NO.13 .... PE:PP=4:1
NO.14 .... PE:PP=5:1
No.15 .... PE:PP=6:1
No.16 .... PE:PP=8:1
No.17 .... PE:PP=10:1
No.18 .... PE:PP=20:1
No.19 .... PE
No.20 .... Unknown sample
PP:Polypropylene
PE:Polyethylene

Specific peak : No. 5

PP＝1：1（No. 10）と最も関係が深いと推定された．同様に基本ピーク 8，11，13 も基本ピーク 5 と同様に PE：PP＝1：1（No. 10）に，基本ピーク 3 は PE：PP＝3：1（No. 12）に，基本ピーク 12 は PE：PP＝2：1（No. 11）に結合しており，それらの混合比のものに最も関係が深いと推定された．

次に各ピーク面積から得られた数値は，Table 4 に示したように，ピークの大きさを示している．しかし，例えば Table 3 の 1 列は 3 から 6 までの，7 列は 1 から 4 までの数値幅をもっておりピーク面積は異なっているが共に数値間のばらつきは 4 である．そのために，3 から 6 までと 1 から 4 までの数値間のばらつきを同一のスケールに補正して（各列をすべて同一の重みにして）計算する必要がある．そこで，各列ごとに平均値を求め，平均値を 50 とすると偏差値に直した後，この数値を用いて計算（クラスター分析）を行った．その結果，基本ピーク 8，11，12，13 は PE：PP＝1：1（No. 10）に，基本ピーク 5 は PE：PP＝2：1（No. 11）に，基本ピーク 3 は PE：PP＝3：1（No. 12）に関係が深いという結果が得られ，それぞれの混合比のものに最も近いことが推定された．しかしデンドログラムで混合比を推定する場合，例えばクラスター距離が 200 以下であった，Fig. 2 の No. 6 と No. 7，No. 4 と No. 5 のようにデンドログラムの上部で結合している場合は非常に類似性が高いことを示しているが，No. 10 と No. 20 はかなり下部で結合しており，クラスター距離が 200 以下で

NII-Electronic Library Service

The Japan Society for Analytical Chemistry

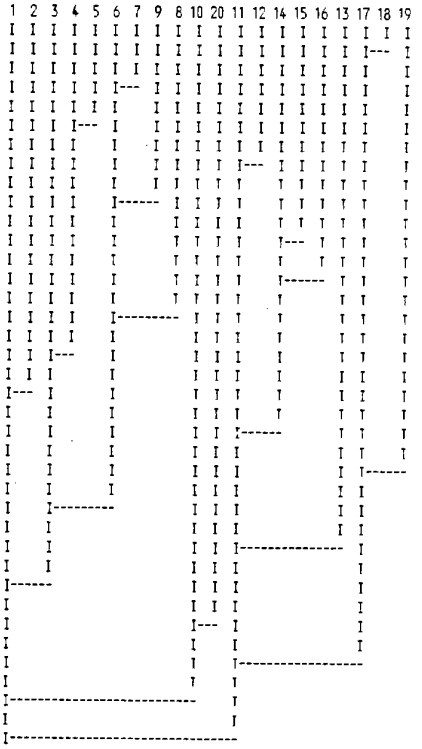

Fig. 2 Dendrogram of cluster analysis
Specific peak : No. 5

あってもそれほど類似性が高いものとは言えない．しかし明らかに No. 1 から No. 9 のものとは異なっていることは結合状態から判断できる．又デンドログラムは，一つの行列内のばらつきの大小を示すクラスター距離に関係なく，類似性の近い順に結合していくので，仮に得られたデンドログラムが全く同一であったとしてもクラスター距離が異なれば類似性には差があることになる．すなわち，全く同一のデンドログラムならばクラスター距離の小さいほど類似性が高い．そこで混合比の推定は，クラスター距離が小さくて，デンドログラムが上部で結合しているほど類似していると判断した．以上のことから，今回の検査試料はクラスター分析結果からは PE : PP=1 : 1 (No. 10) から PE : PP=2 : 1 (No. 11) の間の混合比のものに最も近いものと判断された．

なお今回のようなデータベースは，混合比の異なったもので作成しているので，当然グループ内でばらつきがあり，クラスター距離は大きくなるはずである．今までに他の目的で約 10000 試料を分析した結果から，経験的にグループ内にほとんど差のないもの（ばらつきの小さいもの）については，クラスター距離は 50 以下であり，今回のように混合比の異なるものを計算した場合は当然グループ内でのばらつきはある程度大きくなり，今回のような試料については大体 100 から 200 の間が一般的である．又検査試料を加えない行列（19×26）のクラスター距離も，検査試料を加えた行列（20×26）より 5～10 小さいだけである．もし，クラスター距離が 300 を超えるような場合はグループ内のばらつきが大きすぎ，基本ピークの取り方やパイログラムからのピークの抽出に誤りがあったことを示している．

4・2 数量化理論第 IV 類

データ処理した PE : PP の混合比の異なる 19 種類と検査試料を合わせたものについて，パイログラム中のすべてのピークを計算の対象とし，その中の一つを基本ピークとして前記の方法に従って自然数化後，偏差値に直した行列を用いて相関係数（26×26）を求めた．この方法で，すべてのピークを順次基本ピークとして計算を繰り返した．次いでこれらの相関係数行列から，数量化理論第 IV 類[7]により検査試料の混合比を推定するために必要なピーク（相関係数が +0.5 以内，今回は 27 ピーク）を抽出した．更に抽出した 27 ピークについて，混合比を推定するためのピークとしての重要度を数量化理論第 IV 類で検討した．その結果，例えば Fig. 3 (1) に示した，基本ピーク 5 ではすべてが今回の計算には必要なピークであり，不必要なピークは認められなかった．しかし Fig. 3(2) に示した，基本ピーク 8 ではピーク No. 26 は相関係数が 0.5 以上であり，今回の計算方法で混合比を推定するのには，それほど重要なピークではなくこのピークがなくてもほぼ同様の結果が得られることが明らかとなった．実際の計算では，まず混合比の明らかな 19 種類についてパイログラムから得られたすべてのピークを順次基本ピークとしてクラスター分析を行い，クラスター距離の大きな基本ピークの行列を

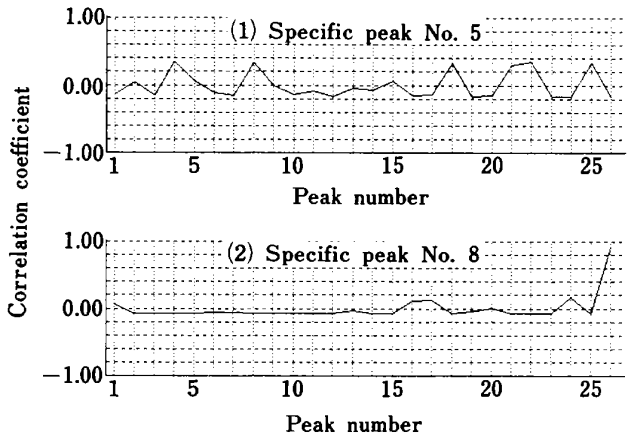

Fig. 3 Result of quantification IV

NII-Electronic Library Service

The Japan Society for Analytical Chemistry

Table 4　Result of principal component analysis

Peak number	Factor loading
1	0.852 -0.097 0.321 0.006 -0.287 0.150 0.056 0.010 0.174 0.019 0.012 -0.156 0.000 -0.023 0.002
2	-0.189 0.833 -0.332 -0.075 0.193 0.044 0.122 -0.175 0.222 -0.079 0.093 0.060 0.042 0.032 0.015
3	0.924 0.109 0.186 -0.009 -0.219 0.116 -0.099 0.135 0.042 -0.007 0.010 -0.019 0.007 -0.060 0.011
4	-0.952 0.141 0.095 0.062 0.163 -0.028 0.119 0.005 0.051 0.135 0.023 0.041 -0.032 0.024 -0.031
5	-0.244 -0.732 0.440 0.167 -0.128 -0.299 0.227 0.015 0.088 0.073 0.019 0.054 0.056 0.078 -0.002
6	0.757 0.195 0.402 0.010 -0.243 0.116 -0.032 -0.243 -0.136 0.030 -0.067 0.250 -0.033 0.036 0.060
7	0.928 0.148 0.139 0.024 0.189 -0.039 -0.017 0.126 -0.043 0.057 0.034 -0.067 -0.113 0.066 0.077
8	-0.933 0.144 0.079 0.059 0.227 -0.048 0.124 -0.013 0.026 0.165 -0.008 0.027 0.005 0.016 -0.011
9	0.098 0.177 0.844 -0.129 0.207 -0.040 -0.327 -0.205 0.119 0.088 0.021 -0.059 0.033 -0.007 -0.015
10	0.894 0.232 0.026 0.105 0.238 0.007 0.132 0.191 0.073 0.047 -0.032 -0.001 -0.011 0.027 0.065
11	0.472 0.669 0.092 0.023 -0.455 -0.070 -0.021 0.290 0.041 0.059 -0.006 0.080 -0.014 0.065 -0.072
12	0.979 0.004 -0.025 -0.015 0.145 -0.019 -0.073 0.021 -0.033 0.039 -0.000 0.002 0.051 0.026 -0.028
13	0.255 -0.232 0.046 0.806 0.155 0.441 -0.023 -0.011 0.057 -0.024 0.026 0.038 -0.014 0.018 -0.024
14	0.343 -0.356 0.382 -0.566 0.302 0.312 0.185 0.186 0.036 -0.055 0.039 0.130 0.005 -0.037 -0.008
15	-0.259 0.489 0.701 0.184 0.177 -0.105 0.215 0.024 -0.141 -0.231 -0.108 -0.101 0.020 0.009 -0.016
16	0.903 0.191 -0.010 0.209 0.011 -0.170 0.140 -0.008 -0.036 0.120 0.000 0.026 0.020 -0.175 0.032
17	0.785 0.072 -0.129 -0.220 -0.191 0.271 0.306 -0.233 -0.070 0.144 -0.068 -0.150 -0.004 0.048 -0.023
18	-0.900 0.188 0.001 0.004 0.258 0.095 -0.070 0.086 -0.141 0.179 -0.048 -0.028 -0.043 -0.030 -0.027
19	0.965 0.023 -0.068 0.109 0.049 -0.151 0.077 -0.050 0.001 0.037 0.025 0.015 0.122 -0.020 0.030
20	0.957 0.088 0.156 0.030 0.087 -0.054 0.027 -0.002 -0.044 0.042 0.163 0.012 -0.040 -0.015 -0.074
21	-0.867 0.138 0.196 0.033 -0.197 0.104 0.064 0.005 -0.179 -0.005 0.310 -0.035 0.055 -0.001 0.020
22	-0.956 0.124 0.161 0.047 -0.143 0.054 0.073 0.042 0.081 0.030 0.002 0.007 -0.034 -0.061 0.061
23	0.979 0.004 -0.025 -0.015 0.145 -0.019 -0.073 0.021 -0.033 0.039 -0.000 0.002 0.051 0.026 -0.028
24	0.937 -0.126 -0.175 -0.036 0.170 -0.082 -0.071 0.015 -0.055 -0.008 0.093 -0.054 -0.007 0.076 0.063
25	-0.917 0.139 0.045 -0.021 -0.061 0.207 -0.107 0.161 -0.036 0.083 -0.069 -0.029 0.187 0.039 0.059
26	0.957 0.022 -0.185 0.028 0.150 0.032 0.022 0.010 -0.063 -0.019 -0.035 0.042 0.106 -0.013 -0.054
Dispersion of principal component	
	16.470　2.461　2.177　1.185　1.079

除外した後，数量化理論第 IV 類で計算に不必要なピークを消去した．このようにして Fig. 1 に示した 27 のピークを選定した．

4・3　主成分分析

混合比の明らかな 19 種類のデータベースに検査試料を加えた偏差値の行列（20×26）から相関係数を求め，主成分分析を行った．主成分分析は，もとの変量との相関係数の 2 乗和を最大化する方法によって求めた．例として，基本ピーク 5 から計算した結果を Table 4 に示した．第一主成分の固有値が 16.470（寄与率約 69%），第二主成分の固有値が 2.461（寄与率約 10%），第三主成分の固有値が 2.177（寄与率約 9%）であることから，この場合は第一主成分のみで判断すればよいことが明らかとなった．次に主成分から主成分得点を計算したところ，例えば基本ピーク 5 からは Table 5 に示したような結果が得られた．検査試料（No. 20）の主成分得点は 50, 25, 23, 45, 49 であるが，固有値から第一主成分得点のみで判定すればよく，PE : PP＝1 : 1（No. 10）の主成分得点 47 と最も近似していることが明らかとなった．更に参考として；第一～五主成分得点を

NII-Electronic Library Service

The Japan Society for Analytical Chemistry

$$S_{ij}=(A_{ij}-50)\times(B_i/C_i)+50$$

S_{ij} : 補正した第 i 主成分の各得点
A_{ij} : 最初に得られた第 i 主成分の各得点
B_i : 第 i 主成分の個有値
C_i : (第 i 主成分の個有値)/(第一から五主成分までの固有値の和)

Table 5 Result of factor score

Sample number*	Factor score				
1	36	58	42	45	58
2	38	48	48	49	48
3	41	48	46	51	55
4	40	55	57	56	58
5	41	49	48	52	55
6	39	48	48	51	49
7	40	49	48	51	51
8	40	57	69	53	55
9	41	51	51	49	44
10	47	48	58	48	13
11	60	49	52	53	40
12	60	45	61	51	52
13	59	39	67	30	61
14	62	40	56	36	57
15	61	40	52	85	57
16	60	50	50	54	45
17	60	67	41	49	53
18	60	67	41	49	53
19	62	67	41	44	46
20	50	25	23	45	49

Specific peak No. 5
*See table 3

の計算式で計算した補正値でクラスター分析を行った．その結果，得られたデンドログラムから検査試料は PE : PP=1 : 1 (No. 10) に最も関係が深いものと推定された．この方法をその他の基本ピークから得られた主成分得点についても行った．ただし，主成分得点は各主成分の固有値が 1.0 未満のものについては，この計算方法ではほとんど影響がないため，計算から除外した．

5 計算結果

PE : PP 混合比の異なる 19 試料と検査試料を加えた 20 試料について，基本ピーク 3, 5, 8, 11, 12, 13 からクラスター分析によるデンドログラムとクラスター距離，偏差値からのクラスター分析によるデンドログラム，主成分分析による寄与率，主成分得点，主成分得点補正値からのクラスター分析によるデンドログラムの 6 項目の結果を Table 6 に示した．クラスター分析結果から得られたデンドログラムでは，基本ピーク 5, 8, 11, 13 は PE : PP=1 : 1 (No. 10) に，基本ピーク 3 は PE : PP=3 : 1 (No. 12) に，基本ピーク 12 は PE : PP=2 : 1 (No. 11) に最も関係が深いことが明らかとなった．又クラスター距離は，いずれも 200 以下であり，分析可能なばらつきの範囲内であった．偏差値のクラスター分析からは基本ピーク 8, 11, 12, 13 は PE : PP=1 : 1 (No. 10) に，基本ピーク 3 は PE : PP=3 : 1 (No. 12) に，基本ピーク 5 は PE : PP=2 : 1 (No. 11) に最も関係が深いことが明らかとなった．主成分分析からは，主成分寄与率がいずれも 64～77 の間にあり，第一主成分得点のみから判断すればよいことが明らかとなった．第一主成分得点からは，基本ピーク 5, 8 は PE : PP=1 : 1 (No. 10) に，基本ピーク 3, 11, 13 は PE : PP=2 : 1 (No. 11) に，基本ピーク 12 が PE : PP=3 : 1 (No. 12) に最も関係が深いという結果が得られた．更に主成分得点を固有値で補正したものからの

Table 6 Result of multivariate analysis

Specific peak No.	Cluster analysis			Principal component	
	Dendrogram (A)	Distance of cluster	Dendrogram from deviation (A)	Factor score (A)	Contribution per cent
3	12	73	12	11	71 8 6
5	10	124	11	10	69 10 9
8	10	142	10	10	64 15 8
11	10	107	10	11	67 13 9
12	11	118	10	12	67 17 6
13	10	132	10	11	77 9 6

A : nearest sample number

NII-Electronic Library Service

The Japan Society for Analytical Chemistry

クラスター分析によるデンドログラムは，すべての基本ピークからの計算結果が PE：PP＝1：1（No. 10）に最も関係が深いことが明らかとなった．

以上のことから，総合的に判断し，検査試料は PE：PP＝1：1（No. 10）の混合比のものに最も近いものであると推定された．更に，この方法を混合比の明らかな 5 試料（PE：PP＝1.2：20, 1：5.2, 2.1：1, 4：1, 10.2：1）について検討したところ，いずれもそれぞれの混合比に最も関係が深いという結果が得られた．これらのことから本方法は PE と PP の混合した試料中の混合比を推定するのに十分利用できるものと考えられた．なお今回の計算方法ではデータベースは 19 種類で行ったが，計算結果から混合比を 2 倍に細分化してもその範囲内で未知試料の混合比の推定が可能であると判断された．

文　献

1) 井上　隆，市原祥次：“ポリマーアロイ”，(1988)，(共立出版)．
2) M. S. Chpudhary, K. Lederer : *Eur. Polym. J.*, **18**, 1021 (1982).
3) 山口茂彦，平野二郎，磯田好弘：分析化学，**35**, 111 (1986).
4) 柘植　新：色材，**61**, 83 (1988).
5) 平柳滋敏，木村和代，佐藤峰雄，原田都弘：日本ゴム協会誌，**55**, 112, 241 (1982).
6) 奥野忠一，芳賀敏郎，矢島敬二，奥野千恵子，橋本茂司，古河陽子：“続多変量解析法”，p. 115～119, p. 207～216 (1981)，(日科技連)．
7) 田中　豊，脇本和昌：“多変量統計解析法”，p. 171～176 (1985)，(現代数学社)．

☆

Determination of blend composition ratio of polyethylene to polypropylene by means of multivariate analysis of pyrograms.

Toshiyuki Mitsui, Munemasa Hida* and Yoshikazu Fujimura** (*Criminal Science Laboratory, Aichi Prefecture, 2-1-1, Sannomaru, Naka-ku, Nagoya-shi, Aichi 460 : **Department of Industrial Chemistry, Faculty of Engineering, University of Chubu, 1200, Matsumoto-cho, Kasugai-shi, Aichi 487)

Multivariate analysis was applied to the estimation of the blend composition ratio of polyethylene to polypropylene using a personal computer. Pyrograms of 19 known blend compositions (known sample) were obtained by pyrolysis GC, individually. Twenty seven peaks were selected from each pyrogram. The area of twenty six peaks were divided by each of six specific peak area and the quotients were given as relative values (1～8). The obtained six matrixes (19×26) were filed in a personal computer. A blend polymer with unknown composition of polyethylene and polypropylene was pyrolyzed and the resulting pyrogram was calculated to obtain relative values (1～8). The matrixes (20×26) of filed unknown sample data were used for the multivariate analysis such as cluster analysis, quantification IV and principal component analysis. The unknown sample was compared with 19 known samples using cluster distance, dendrogram, principal component score and determined blend composition of 1 : 1.

(Received February 1, 1989)

Keyword phrases

blend composition ratio of polyethylene to polypropylene; cluster analysis; quantification IV; principal component; personal computer; pyrolysis GC.

NII-Electronic Library Service