The Japan Society for Analytical Chemistry

BUNSEKI KAGAKU Vol. 55, No. 8, pp. 561–566 (2006)

© 2006 The Japan Society for Analytical Chemistry

報　文

改重回帰分析によるアクリロニトリル-ブタジエン-スチレン共重合樹脂中のアクリロニトリル，ブタジエン，スチレン混合率の測定

松下　晃[1]，南　幸男[1]，三井　利幸®[2]，尾崎　幸洋[3]

主成分回帰分析（PCR）等の方法では，定量操作が煩雑で信頼性の低い結果しか得られない3種類の成分が混合した試料中の各成分の定量を，改重回帰分析（DCR）を用いて精度よく非分離で定量することが可能となった．今回は，DCRをアクリロニトリル-ブタジエン-スチレン共重合樹脂（ABS樹脂）中のアクリロニトリル，ブタジエン，スチレンの混合率の定量に応用した．方法は，混合率既知の4種類の既知試料と未知試料を近赤外分光分析（NIR）で測定し，得られた351個の測定値をそれぞれの最大吸光度値で除し補正値とした．次いで，4種類の既知試料の補正値を説明変数，未知試料の補正値を目的変数として四元一次の重回帰式を作成し，重回帰式の4個の係数から3成分の混合率を定量した結果，比較的精度よく定量できた．更に，DCRとPCRとの定量精度の比較を，ポリ-4-ビニルフェノールとポリメチルメタクリレートの混合樹脂を用いて検討したところ，DCRはPCRよりも精度よく定量できることが明らかとなった．

1　はじめに

ケモメトリックスを用いた非分離分析による定量分析法については，既に主成分回帰分析（PCR）やpartial least squares analysis（PLS）による方法[1)~6)]が数多く報告されている．しかしながら，これらの方法は3種類以上の成分が混合した試料については，混合率既知の試料（既知試料）を多く必要とするために適用が難しい．したがって，混合している各成分の近赤外吸収波長領域が明確に異なっているような場合を除き，合成樹脂のような分離操作が不可能な試料については，従来からの方法では精度の高い定量は困難である．

改重回帰分析（DCR）[6)7)]は，2から5種類の成分が混合した試料から非分離で各成分を精度よく定量することが可能であり，検量線を作成する必要がないので測定する既知試料数が少なく，定量時間を短縮することができる．仮に各成分そのものを既知試料として使用すれば，3成分が混合している未知試料なら4試料を測定するだけで，未知試料中の混合率の定量が可能である．

今回は，3成分が混合したアクリロニトリル-ブタジエン-スチレン共重合樹脂（ABS樹脂）の混合率の定量にDCRを適用したところ，満足する結果が得られたので報告する．

[1] 大阪府警察本部科学捜査研究所：541-0053　大阪府大阪市中央区本町1-3-18
[2] 数値解析研究所：475-0833　愛知県半田市花園町1-18-28
[3] 関西学院大学理工学部：669-1337　兵庫県三田市学園2-1

2　実験及び結果

2・1　試　料

ABS樹脂は，アクリロニトリル（A），ブタジエン（B），スチレン（S）の混合率が異なる14種類の直径2～3 mm，高さ4～5 mmの円柱形のABS樹脂を使用した．

なお，DCRと従来法との定量精度の比較を行う目的で，ポリメチルメタクリレート（PMMA）とポリ-4-ビニルフェノール（PVPh）の2成分が混合した厚さ3 mm，直径2 cmのディスク形の合成樹脂を使用した．実験に用いたABS樹脂は市販の分析用製品を，PVPh-PMMA混合樹脂は丸善石油化学で製造されたものをそのまま使用した．

既に説明したように，DCRでは混合しているA，B，Sそのものを測定すれば，未知試料中の混合率の定量が可能であるが，今回はA，B，Sの入手が困難であったので，ABS樹脂の各成分混合率（w%）が比較的異なる4試料（A：B：S＝19.80：26.60：53.60，20.30：18.50：61.20，30.50：20.00：49.50，39.80：12.00：48.20）を既知試料として使用した．A，B，Sの混合率が大きく異なっている既知試料であれば，3種類の既知試料でも定量可能であるが，Aと比較してBとSの混合率の変化範囲が1/2程度の既知試料しか入手できなかったので，4種類の既知試料を使用して定量した．PVPh-PMMA混合樹脂については，

NII-Electronic Library Service

The Japan Society for Analytical Chemistry

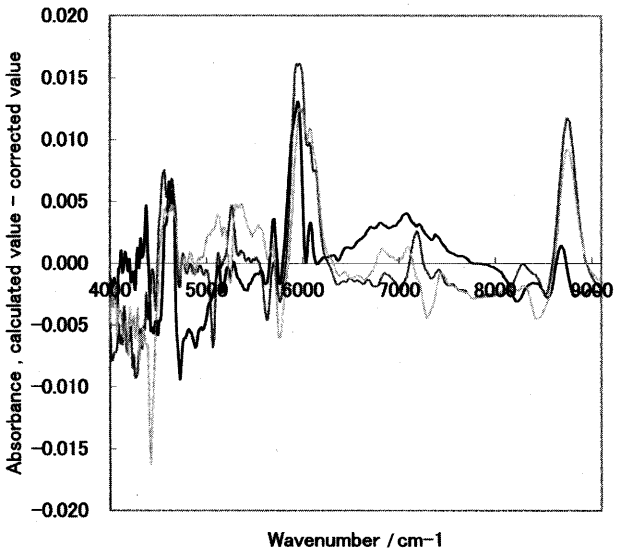

Fig. 1 Difference of the absorbance of ABS resin between calculated value and corrected value
—— No.1; —— No.5; ····· No.10
No.1, 5, 10: see table 1

PVPh 混合率が 1.00 と 10.00 w% の 2 試料を既知試料として使用した.

2・2 測定方法

ABS 樹脂については，ブランルーベ製のインフラライザー 500 型に，粒状（ペレット状）の試料を測定するときにペレットの向きや粒度などが測定スペクトルに及ぼす影響を除去するために試料容器を回転させる回転ドローアを取り付け，近赤外反射スペクトルを分解能 5 cm^{-1} で 4000 から 9091 cm^{-1} 間を 3 回測定した．定量には 3 回の平均値を使用した.

PVPh-PMMA 混合樹脂については，横河電機製の FIR1000 型を用いて，透過法により分解能 3 cm^{-1} で 4000 から 12000 nm 間を 50 回積算した．定量にはこの積算値を使用した.

2・3 測定値の補正（規格化）

DCR で定量するためには，相対的にスペクトルの強度を同一にする必要がある．そのために，ABS 樹脂を NIR で測定し得られた 351 個の測定値から，その測定値内の最小値を差し引いた後最大値で除して，すべての試料の測定値を 0.000 から 1.000 間の数値になるように変換した．A，B，S の混合率の定量には，この方法で補正した 351 個の変換された測定値（以下補正値）を用いて行った．PVPh-PMMA 混合樹脂についても，ABS 樹脂の場合と同様の方法で，各試料の 3891 個の測定値を 0.000 から 1.000 間の数値に変換した補正値を用いて定量した.

2・4 定量計算

2・4・1 ABS 樹脂の混合率の定量 今回は，DCR による ABS 樹脂の混合率の定量に 4 種類の既知試料を用いているので，重回帰式は 351 個の未知試料（y_β，$\beta = 1, 2, 3, \cdots, 351$）と 4 種類の既知試料（$x_{\alpha\beta}$，$\alpha = 1, 2, 3, 4$，$\beta = 1, 2, 3, \cdots, 351$）の補正値から計算された未知試料の計算値（$Y_\beta$，$\beta = 1, 2, 3, \cdots, 351$）と補正値との差の合計が最小になるように形成される．計算値は，作成された重回帰式に順次 4 既知試料の補正値を代入していけば，それに対応した未知試料の計算値が得られる．例えば，式（1）に示したような重回帰式が得られたとすれば，

$$Y_\beta = b_1 x_{1\beta} + b_2 x_{2\beta} + b_3 x_{3\beta} + b_4 x_{4\beta} + b_0 \quad (1)$$

最初の補正値（y_1）に対する計算値（Y_1）は，

$$Y_1 = b_1 x_{11} + b_2 x_{21} + b_3 x_{31} + b_4 x_{41} + b_0 \quad (2)$$

150 番目の補正値（y_{150}）に対する計算値（Y_{150}）は，

$$Y_{150} = b_1 x_{1150} + b_2 x_{2150} + b_3 x_{3150} + b_4 x_{4150} + b_0 \quad (3)$$

300 番目の補正値（y_{300}）に対する計算値（Y_{300}）は，

$$Y_{300} = b_1 x_{1300} + b_2 x_{2300} + b_3 x_{3300} + b_4 x_{4300} + b_0 \quad (4)$$

となる.

このようにして計算した未知試料 1，5，10 の 351 個の計算値と補正値の差（$y_\beta - Y_\beta$，$\beta = 1, 2, 3, \cdots, 351$）を Fig. 1 に示した．DCR は，既知試料と未知試料のノイズレベルが同程度であればそれらの補正値は使用可能であるし，仮に既知試料か未知試料のいずれかに 1～2 箇所ノイズが発生しても 351 個の補正値を使用しているのでほとんど定量結果に影響はない.

式（2），（3），（4）からも明らかなように，未知試料の 351 個の計算値はすべて式（1）の重回帰式から計算されている．したがって，式（1）の重回帰式の既知試料 1（$x_{1\beta}$）に対する係数（b_1），既知試料 2（$x_{2\beta}$）に対する係数（b_2），既知試料 3（$x_{3\beta}$）に対する係数（b_3），既知試料 4（$x_{4\beta}$）に対する係数（b_4）は，1 から 351 までのどの補正値に対しても常に同一数値を用いて補正値に対する計算値を算出していることになる．このことは，未知試料の計算値を求めるときに使用される 4 種類の既知試料の使用割合は，どの補正値から計算値を算出しても同一の数値を用いていることになり，混合率を定量するための既知試料の使用割合は重回帰式の係数で示されていることを意味

NII-Electronic Library Service

The Japan Society for Analytical Chemistry

Table 1　Determination result of ABS resin

Sample No.	1	2	3	4	5
A[a)]	24.77	32.31	20.54	21.48	20.92
B[a)]	19.86	16.78	20.16	17.45	18.09
S[a)]	55.37	50.91	59.30	61.07	60.99
A[b)]	23.00	30.35	21.30	22.10	21.80
B[b)]	22.00	14.00	18.30	13.60	18.60
S[b)]	55.00	55.65	60.40	64.30	59.60
Sample No.	**6**	**7**	**8**	**9**	**10**
A[a)]	29.40	37.66	36.92	32.06	32.38
B[a)]	19.30	13.46	15.88	24.21	21.14
S[a)]	51.30	48.88	47.21	43.73	46.48
A[b)]	30.40	37.30	37.00	35.80	36.09
B[b)]	16.00	14.85	16.50	23.10	20.28
S[b)]	53.60	47.85	46.50	41.10	43.63

a) Calculated value (w%); b) Theoretical value (w%); A: Acrylonitrile; B: Butadiene; S: Styrene.

Samples for calibration:

	x_1	x_2	x_3	x_4
A	19.80	20.30	30.50	39.80
B	26.60	18.50	20.00	12.00
S	53.60	61.20	49.50	48.20

Multiple regression and multiple correlation of samples: No.1: $y = 0.3560x_1 + 0.4036x_2 + 0.0063x_3 + 0.2353x_4 - 0.0024$, $R = 0.99994$; No.2: $y = -0.2246x_1 + 0.2215x_2 + 0.8363x_3 + 0.1825x_4 - 0.0019$, $R = 0.99976$; No.3: $y = 0.1838x_1 + 0.7890x_2 + 0.0655x_3 - 0.0169x_4 - 0.0055$, $R = 0.99987$; No.4: $y = -0.2574x_1 + 1.1011x_2 + 0.2779x_3 - 0.0897x_4 - 0.0052$, $R = 0.99987$; No.5: $y = -0.1640x_1 + 1.0246x_2 + 0.2234x_3 - 0.0893x_4 - 0.0020$, $R = 0.99989$; No.6: $y = -0.0629x_1 + 0.1777x_2 + 0.8902x_3 + 0.0030x_4 - 0.0010$, $R = 0.99992$; No.7: $y = 0.8585x_1 + 0.0157x_2 + 0.0139x_3 + 0.8887x_4 - 0.0008$, $R = 0.99997$; No.8: $y = 0.1849x_1 - 1.840x_2 + 0.3012x_3 + 0.7075x_4 - 0.0033$, $R = 0.99997$; No.9: $y = 1.1506x_1 - 0.8365x_2 + 0.1194x_3 + 0.5755x_4 - 0.0031$, $R = 0.99997$; No.10: $y = 0.7203x_1 - 0.4510x_2 + 0.1933x_3 + 0.5363x_4 - 0.0013$, $R = 0.99991$

している．このことから，重回帰式の係数を使用すれば，未知試料の混合率（Mix）を計算することが可能[7]となる．4種類の既知試料からの各成分の定量は式（5）から求められる．

$$\mathrm{Mix}(\%) = (k_1 \times b_1 + k_2 \times b_2 + k_3 \times b_3 + k_4 \times b_4)/(b_1 + b_2 + b_3 + b_4) \quad (5)$$

ただし，k_1：既知試料1の目的成分の混合率，k_2：既知試料2の目的成分の混合率，k_3：既知試料3の目的成分の混合率，k_4：既知試料4の目的成分の混合率．

Table 1に示した未知試料1の重回帰式の係数からのABS混合率の定量方法は，得られた重回帰式が式(6)になる．

$$Y_\beta = 0.3560\,x_{1\beta} + 0.4036\,x_{2\beta} + 0.0063\,x_{3\beta} + 0.2353\,x_{4\beta} - 0.0024 \quad (6)$$

ただし，$\beta = 1, 2, 3, \cdots, 351$，$x_{1\beta}$：A：B：S＝19.80：26.60：53.60の補正値，$x_{2\beta}$：A：B：S＝20.30：18.50：61.20の補正値，$x_{3\beta}$：A：B：S＝30.50：20.00：49.50の補正値，$x_{4\beta}$：A：B：S＝39.80：12.00：48.20の補正値

したがって，式（6）の重回帰式の係数とTable 1に示した既知試料の定量目的成分の混合率を式（5）に代入すると，アクリロニトリル（A）の混合率は，$(19.80 \times 0.3560 + 20.30 \times 0.4036 + 30.50 \times 0.0063 + 39.80 \times 0.2353)/(0.3560 + 0.4036 + 0.0063 + 0.2353) \fallingdotseq 24.769 \fallingdotseq 24.77$ w%，ブタジエン（B）の混合率は，$(26.60 \times 0.3560 + 18.50 \times 0.4036 + 20.00 \times 0.0063 + 12.00 \times 0.2353)/(0.3560 + 0.4036 + 0.0063 + 0.2353) \fallingdotseq 19.862 \fallingdotseq 19.86$ w%，スチレン（S）の混合率は，$(53.60 \times 0.3560 + 61.20 \times 0.4036 + 49.50 \times 0.0063 + 48.20 \times 0.2353)/(0.3560 + 0.4036 + 0.0063 + 0.2353) \fallingdotseq 55.369 \fallingdotseq 55.37$ w%となる．

10種類の未知試料についてABSの混合率を定量した結果と重回帰式，相関係数をTable 1に示した．Table 1の結果から明らかなように，10種類の未知試料はいずれも理論値と比較的よく一致し，重回帰式の相関係数はTable 1に示したように0.99987から0.99997間の数値を示した．相関係数が高いことは，補正値と計算値とがよく一致していることを示唆しており，4種類の既知試料と10種類の未知試料の測定値は変動が小さく定量に適したものであると考えられた．

Aが23.00 w%，Bが22.00 w%，Sが55.00 w%のABS樹脂を用いて再現性を検討したところ，5回の測定結果からの相対標準偏差はAが0.82%，Bが1.25%，Sが0.67%となり，本方法は極めて精度の高い定量結果が得られる方法であると考えられた．

2・4・2　PVPh-PMMA混合樹脂中のPVPh含有率の定量

DCRの定量結果の精度を，従来から行われているPCRと比較する目的で，まずPVPh混合率が1.00と10.00 w%のPVPh-PMMA混合樹脂を既知試料とし，近赤外分光分析（NIR）で測定し，0.000から1.000に変換した3891個の補正値を用いて8種類の未知試料のPVPh含有率を定量した．Fig. 2に未知試料1，3，6の計算値と補正値との差（$y_\beta - Y_\beta$，$\beta = 1, 2, 3, \cdots, 3891$）を示した．更にTable 2に示したように，8種類の未知試料は0.99980から0.99999間の相関係数を示し，2種類の既知試料と8種類の未知試料の測定値は変動が小さく定量に適したものであると考えられた．

Table 2に示した未知試料1のPVPh含有率の定量は，

NII-Electronic Library Service

The Japan Society for Analytical Chemistry

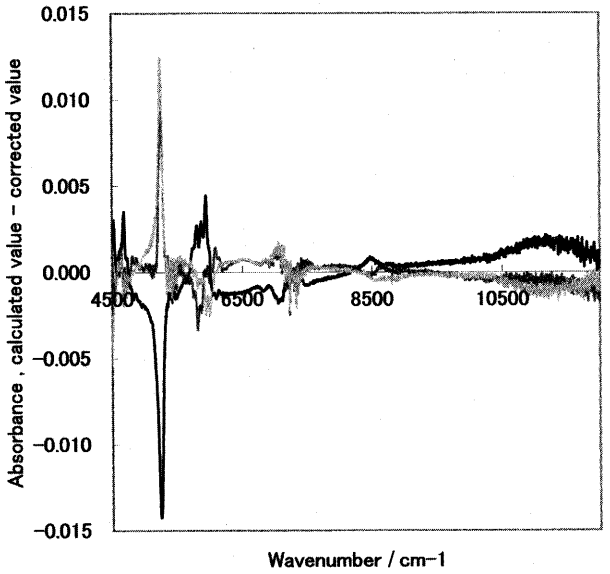

Fig. 2 Difference of the absorbance of PVPh-PMMA resin between calculated value and corrected value
—— No.1; —— No.3; ------ No.6
No.1, 3, 6: see table 2

得られた重回帰式が式(7) となる.

$$Y_\beta = 0.8990\, x_{1\beta} + 0.1028\, x_{2\beta} - 0.0004 \qquad (7)$$

ただし, β = 1, 2, 3, …, 3891, $x_{1\beta}$: PVPh 1.00 w% の補正値, $x_{2\beta}$: PVPh 10.00 w% の補正値.

したがって, 式(5) に既知試料の PVPh 含有率 1.00, 10.00 と式(7) の係数 0.8990, 0.1028 を代入すると, PVPh 含有率は, (1.00 × 0.8990 + 10.00 × 0.1028)/(0.8990 + 0.1028) ≒ 1.923 ≒ 1.92 w%となる. 8 種類の未知試料について PVPh の含有率を定量した結果と重回帰式, 相関係数を Table 2 に示した. Table 2 から明らかなように, いずれの未知試料も理論値とよく一致した定量結果を示した.

PCR や PLS は 3 種類以上の成分が混合している場合は, 正確な定量結果を得るためには多くの既知試料を必要とするために, 3891 個の補正値で精度よく定量できることを確認した PVPh-PMMA 混合樹脂を用いて DCR と PCR で PVPh の含有率を定量し, 定量精度の比較を行った. PCR の定量は, 計算ソフトの関係で 3891 個の補正値を使用することができない. そこで, 同一の条件で定量結果を比較するために, 比較的吸収スペクトルに吸収が認められた 4501 から 8001 cm^{-1} 間の 348 個の測定値から得られた補正値を用いて, PCR と DCR で定量した. PCR と DCR による定量結果を Table 2 に示した. Table 2 から明らかなように, DCR は PCR よりも精度の高い定量結果が得られた. 定量精度の比較に PCR を用いたのは, PLS は未知試料の定量目的である混合率の予測値を定量計算に使用する必要があるためである.

Table 2 Determination result of PVPh in PVPh-PMMA resin

Sample No.	1	2	3	4
DCR[a)]	1.92	2.99	3.96	4.81
DCR[b)]	1.83	2.99	3.99	4.88
PCR	1.84		3.76	
T. V.	2.00	3.00	4.00	5.00
Sample No.	5	6	7	8
DCR[a)]	5.89	7.32	8.01	8.69
DCR[b)]	5.91	7.36	7.98	8.66
PCR	5.83	7.33	7.67	8.55
T. V.	6.00	7.00	8.00	9.00

PVPh: Poly 4-vinyl phenol; PMMA: Poly methyl metacrylate; T.V.: Theoretical value (w%); a) The 3891 categories were used; b) The 348 categories were used; PCR: The 348 categories were used; PCR: principal components regression analysis; DCR: 1.00 and 10.00 w% of PVPh were used for calibration sample; PCR: 1.00, 3.00, 5.00, and 10.00 w% of PVPh were used for calibration sample. Multiple regression and multiple correlation of samples: No.1: $y = 0.8990x_1 + 0.1028x_2 - 0.0004$, $R = 0.99979$; No.2: $y = 0.7824x_1 + 0.2217x_2 + 0.0002$, $R = 0.99999$; No.3: $y = 0.6705x_1 + 0.3286x_2 + 0.0003$, $R = 0.99994$; No.4: $y = 0.5865x_1 + 0.4313x_2 + 0.0010$, $R = 0.99990$; No.5: $y = 0.4553x_1 + 0.5405x_2 - 0.0002$, $R = 0.99980$; No.6: $y = 0.2960x_1 + 0.6984x_2 + 0.0002$, $R = 0.99992$; No.6: $y = 0.2960x_1 + 0.6984x_2 + 0.0002$, $R = 0.99992$; No.7: $y = 0.2173x_1 + 0.7663x_2 - 0.0011$, $R = 0.99982$; No.8: $y = 0.1440x_1 + 0.8421x_2 - 0.0010$, $R = 0.99998$

なお, 一般的には NIR の測定値を用いた定量には PLS を使用しているので, 未知試料の PVPh の含有率が 9.00 w% までであることを考慮して, 定量目的である混合率の予測値に 0.00 を代入して PLS でも定量したところ, 理論値 2.00, 4.00, 6.00, 7.00, 8.00, 9.00 w% に対し, 1.84, 3.75, 5.82, 7.32, 7.66, 8.55 w% の結果が得られ, PCR と極めて近似した定量結果が得られた.

3 考 察

DCR による定量計算は, 市販の製品の表示が小数点以下第 2 位まで表示されていたので, 計算の有効数字は小数点以下第 2 位までとした. ABS 樹脂については微量の混合比については検討していないので, 正確なことは明らかでない. しかし, PVPh-PMMA 混合樹脂の定量結果から, 既知試料に精度の高い測定値を使用すれば混合率の定量限界は 1% 程度と考えられる.

既に説明したように, PCR や PLS は 3 種類以上の成分が混合している場合は, 正確な定量結果を得るためには多くの既知試料を必要とする. それに対し DCR は, 3 成分以上が混合していても既知試料として混合している各成分

NII-Electronic Library Service

The Japan Society for Analytical Chemistry

のみを測定するだけで精度よく定量することができる．しかしながら，DCRは既知試料で測定した成分のみで構成されていると仮定しているので，それ以外の成分が混合している場合は，相関係数が低下するような場合を除き既知試料で測定した成分以外は無視されて定量される．したがって，今回使用した試料には含有されていないが，硬化剤や着色剤が混入されていれば，それらの情報が得られる分析機器による測定値も利用して混合比を求めないと定量結果の信頼性が低下する．

更に，DCRは少ない既知試料数で定量するので，既知試料に数多くのノイズや測定時の条件の影響で測定値が乱れると定量結果に大きく影響する．したがって，従来の検量線を作成する方法と比較してより精度の高い測定値が必要である．定量精度の比較のために行ったPCRによる定量では，PVPh混合率が1.00，3.00，5.00，10.00 w% の既知試料を使用したが，これに定量結果がやや悪いPVPhの混合率7.00% を加えた5種類の既知試料で定量しても，理論混合率2.00，4.00，6.00，8.00，9.00 w% の定量結果は1.74，3.74，5.74，8.35，8.5 w% となり，定量結果にそれほど大きな差は認められなかった．しかし，DCRでは既知試料として使用したPVPh混合率1.00と10.00 w% に変えて，測定値にやや変動の見られたPVPh混合率1.00と7.00 w% を使用して定量すると，PVPhの理論混合率2.00，3.00，4.00，5.00，6.00，8.00，9.00，10.00 w% の試料の定量結果は，それぞれ1.81，2.88，3.88，4.59，5.67，7.64，8.27，9.44% となり，PVPh混合率1.00と10.00 w% を使用した場合より定量精度が大きく低下する．

DCRで定量する場合は，既知試料や未知試料の測定値をすべて0.000から1.000間の数値に補正しているので，もしも，同一濃度で混合している各成分そのものを測定したとき，測定値の強度（感度）が微妙に異なっていると，既知試料に各成分そのものを用いた場合は，式(5)で得られた各成分の定量結果を補正する必要がある．例えば，C，D，Eの3成分が混合している未知試料をC，D，Eの各成分そのものを既知試料として式(5)から定量し，混合率 t，u，v が得られたとする．C，D，E 3成分の強度が微妙に異なり，測定値の最大強度値の比が $m:n:p$（p が最も強度値が低い値）であったならば，まず得られた混合率（t，u，v）と最大強度値の比（$m:n:p$）から式(8)で，

$$C' = t \times (p/m), D' = u \times (p/n), E' = v \times (p/p) \quad (8)$$

が計算される．C'，D'，E' の和が100% にならないので式(9)で，

$$C = C'/(C' + D' + E'), D = D'/(C' + D' + E'), E = E'/(C' + D' + E') \quad (9)$$

と計算して，真のC，D，Eの混合率を求めなければならない．したがって，混合率の大きく異なる既知試料が入手可能であれば，できる限り既知試料には混合物を使用することが望ましい．

DCRでは，計算値を補正値と可能な限り近似するように計算しているので，未知試料に定量目的以外の成分が混合していると，その成分の吸収がある波長領域の計算値と補正値との差が大きくなり，結果的に計算値と補正値の吸収スペクトルが異なった形状を示す波長領域が存在する．このような場合は，未知試料の補正値から計算値を差し引くと，定量目的以外の成分の吸収スペクトルが得られることになる．

今回のABS樹脂やPVPh-PMMA混合樹脂中のPVPh含有率の定量では，351個や3891個の測定値を用いて定量しており，いずれの未知試料も計算値と補正値との差が小さく，重回帰式の相関係数が0.99990以上を示していることから，未知試料に既知試料以外の成分が混合している可能性は低いものと考えられる．

4　結　　語

従来の方法では非分離で定量することが困難であったABS樹脂の3成分の混合率を，DCRで精度よく定量することができた．DCRは検量線を作成しないので定量に必要な所要時間の短縮が可能であった．更に，DCRはPCRと比較して精度よく定量できることが明らかとなった．

今後は，種々の測定機器から得られた測定値を用いて，分離が困難な試料についての定量を検討していくつもりである．

文　　献

1) 中村　洋訳：“ケルナー分析化学”, p. 1305 (2003), (科学技術出版); R. A. Kellner, J.-M. Mermet, M. Otto, H. M. Widmer: “*Analytical Chemistry*”, (1998), (Wiley-VCH, Weinheim).
2) 宮下芳勝，佐々木慎一：“ケモメトリックス，化学パターン認識と多変量解析”, p. 54 (1995), (共立出版).
3) 相島鉄郎：“ケモメトリックス”, p. 114 (1992), (丸善).
4) 三井利幸：“ケモメトリックスの基礎と応用”, p. 37 (2003), (アイピーシー).
5) T. Mitsui: *Anal. Sci.*, **17**, i475 (2001).
6) 三井利幸，奥山修司，肥田宗政：分析化学 (*Bunseki Kagaku*), **53**, 773 (2004).
7) 三井利幸，奥山修司：*J. Computer Aided Chemistry*, **6**, 29 (2005).

NII-Electronic Library Service

The Japan Society for Analytical Chemistry

Measurement of Mixing Ratio of Acrylonitrile, Butadiene, and Styrene in Acrylonitrile-Butadiene-Styrene Copolymer by Different Calculation Method of Regression Analysis

Akira MATSUSHITA[1], Yukio MINAMI[1], Toshiyuki MITSUI[2] and Yukihiro OZAKI[3]

[1] Forensic Science Laboratory, Osaka Prefectural Police Headquarters, 1-3-18, Honmachi, Chuo-ku, Osaka-shi, Osaka 541-0053
[2] Data Analysis Laboratory, 1-1-18, Hanazono-cho, Handa-shi, Aichi 475-0833
[3] Kwansei Gakuin University, 2-1, Gakuen, Sanda-shi, Hyogo 669-1337

(Received 18 January 2006, Accepted 11 May 2006)

A different calculation method of regression analysis (DCR) can be carried out for the determination of each compound correctly with three or more kinds of compounds in a sample without any separation operation. The determination of DCR is based on the coefficient value of heavy regression, calculated using the measured (corrected) values of known and unknown samples. This time, DCR was used to determine the mixing ratio of the acrylonitrile-butadiene-styrene copolymer (ABS resin) in which acrylonitrile, butadiene, and styrene compounds were mixed. The measured data of NIR spectral analysis was used to analyze the ABS resin. Analyses of ten unknown samples were carried out using four known samples. In this result, the calculated and theoretical values of all unknown samples were approximated closely.

Keywords : different calculation method of regression analysis; synthetic resin; NIR spectral analysis.

NII-Electronic Library Service