

## 保留剤から分離することによる香気成分の抽出

独立成分分析(ICA)を利用して、不要な化合物を分離し香気成分のみを抽出する。一例として、香気分析で矛盾を引き起こす可能性がある無臭の保留剤から分離された香水香気成分データを抽出する。

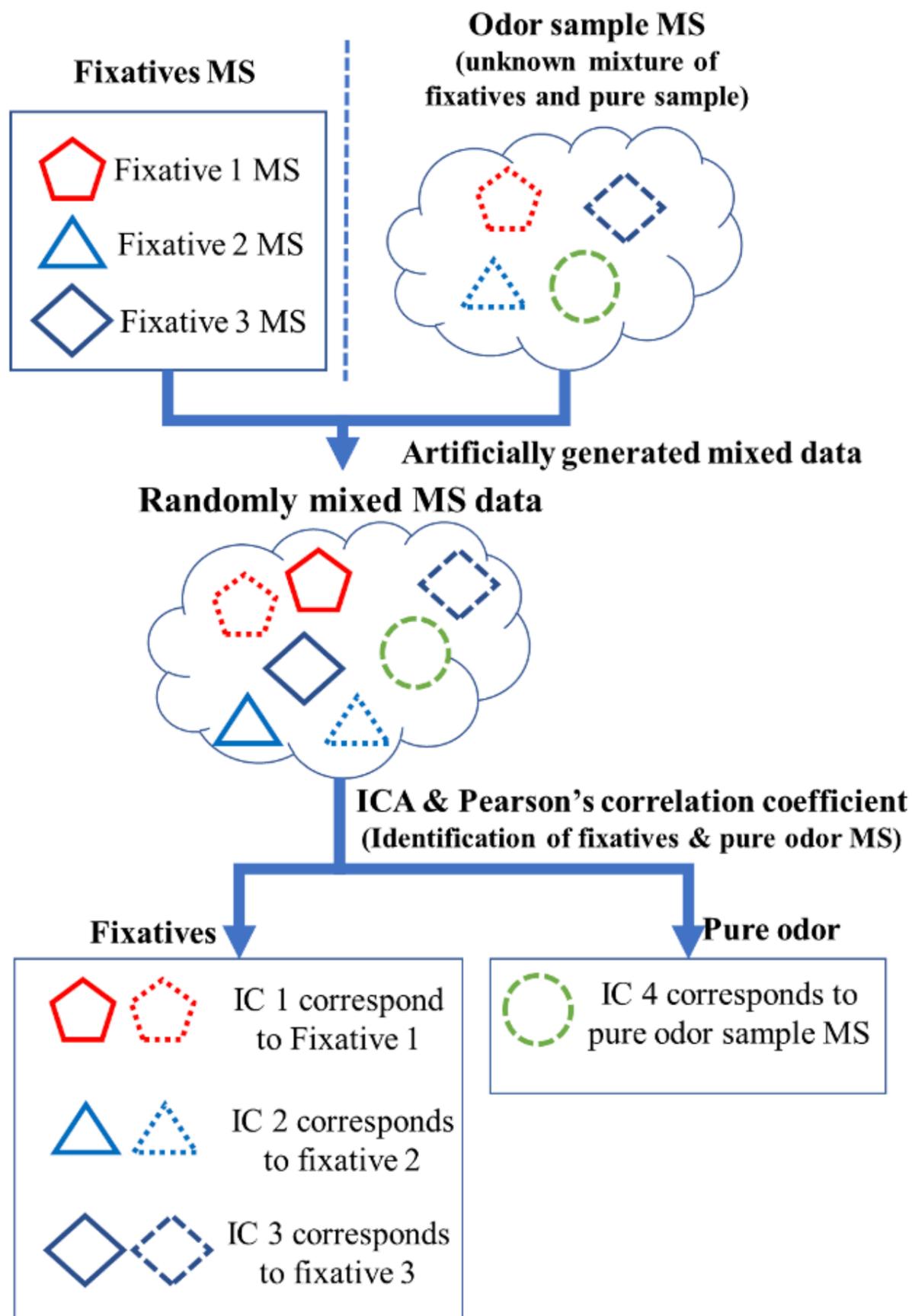


図1. 独立成分分析(ICA)を利用して保留剤を分離し香気成分データを抽出する手順

### 香水香気成分を抽出する処理方法

1. 匂いサンプルマススペクトルを集める
2. 独立成分分析(ICA)で解析する
3. 香気成分を抽出する

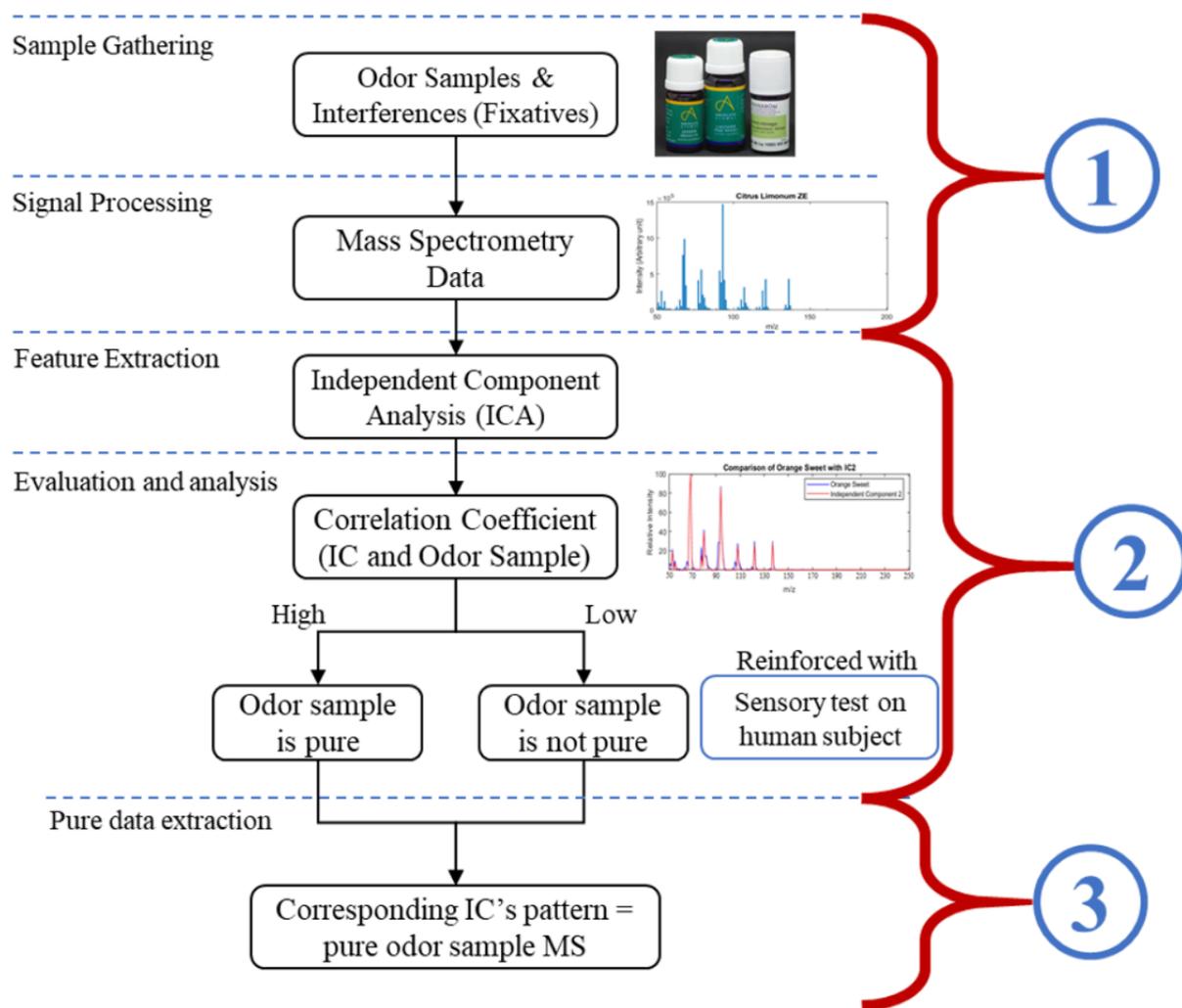
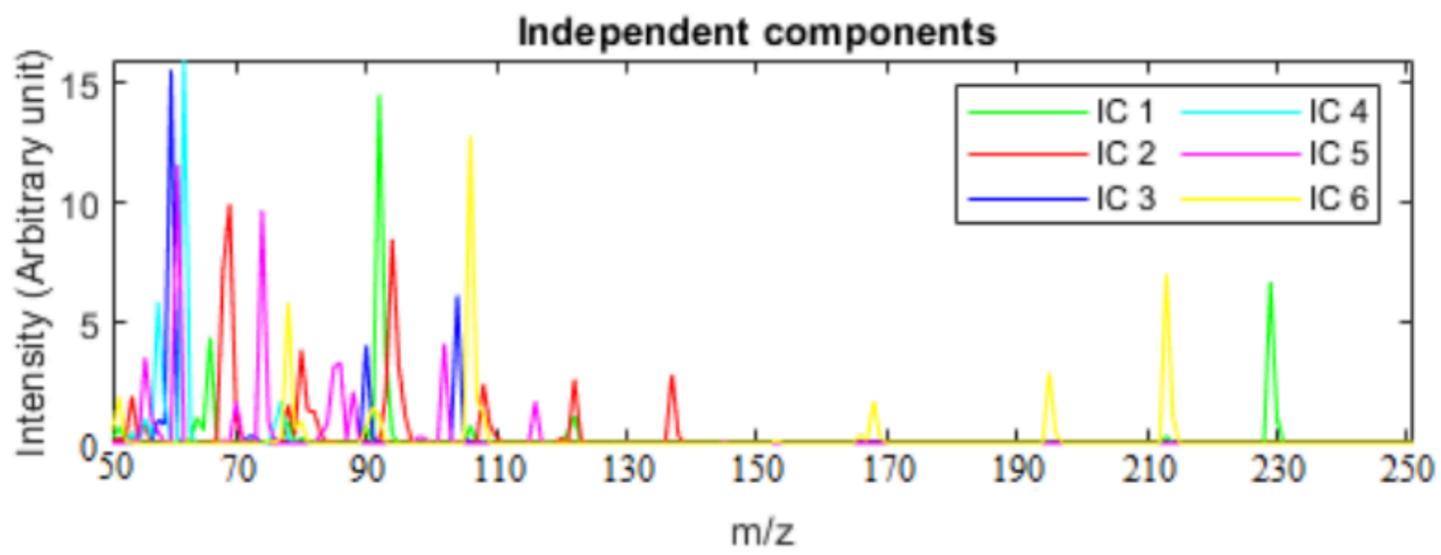


図2. 香気成分データを抽出する手順

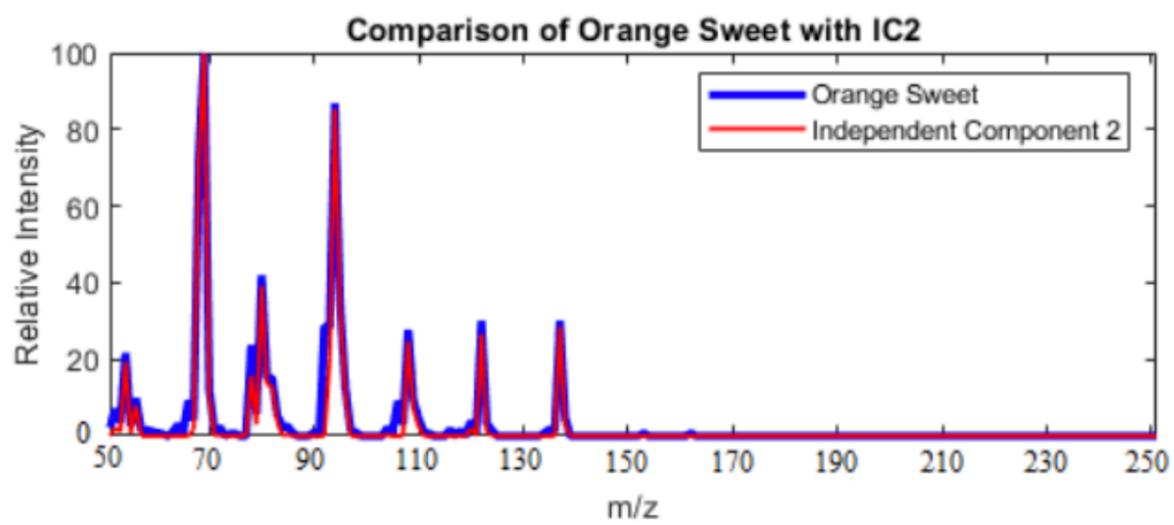
ICAは独立成分(IC)を順番に抽出できない。したがって、Pearson 相関係数を適用して各ICを識別しどれが香気成分の IC かを判定する。識別例を以下の表に示す。マススペクトル空間で干渉が存在しても ICA は高い相関関係を持つ香気臭に対応する独立成分を抽出できることを実証した。

表1. Orange sweet 匂いサンプルの元のデータと独立成分(IC)間の相関係数

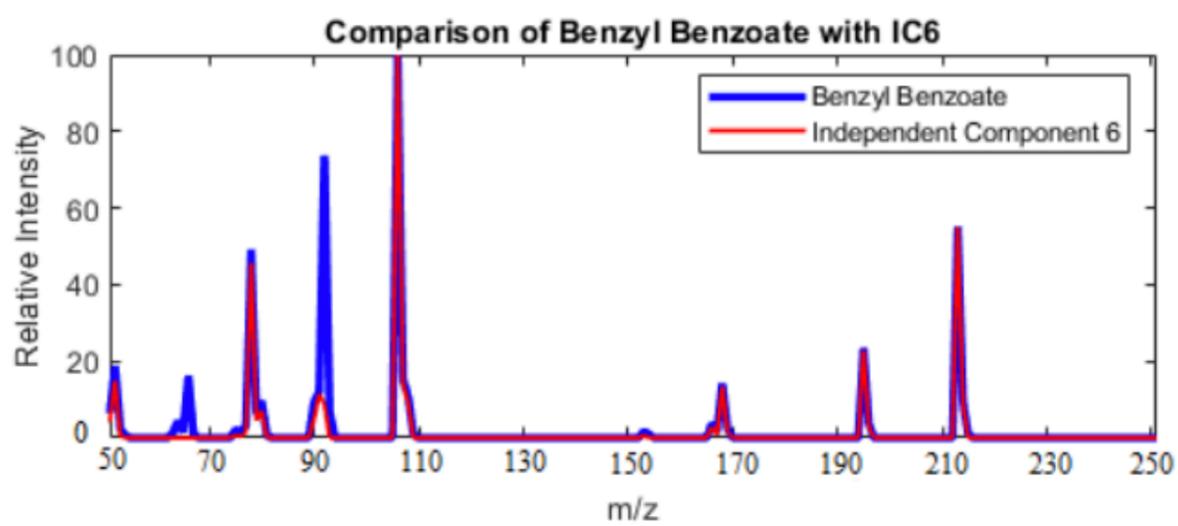
	IC 1	IC 2	IC 3	IC 4	IC 5	IC 6
Orange sweet	0.19	0.98	0	0.01	0	0.07
Benzyl benzoate	0.51	0.01	0	0.01	0.01	0.86
Benzyl salicylate	0.99	0.03	0	0.01	0.01	0.06
Propylene glycol	0	0	0.1	0.99	0.05	0
Dipropylene glycol	0	0.01	0.99	0.02	0.03	0
Octanoic acid	0.01	0.01	0.02	0.1	0.99	0.01



(a)



(b)



(c)

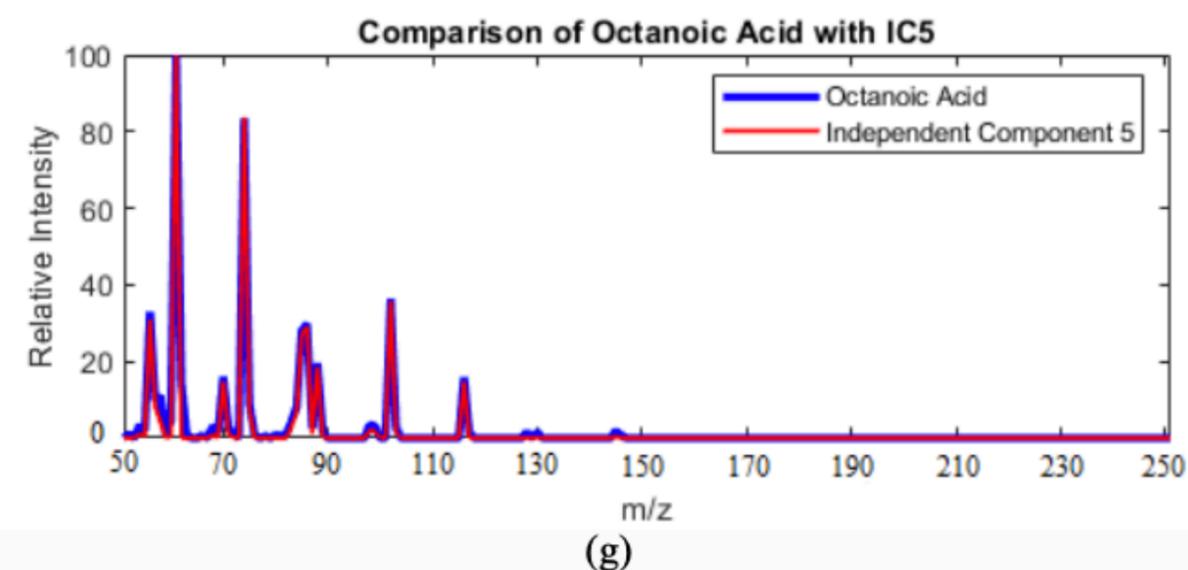
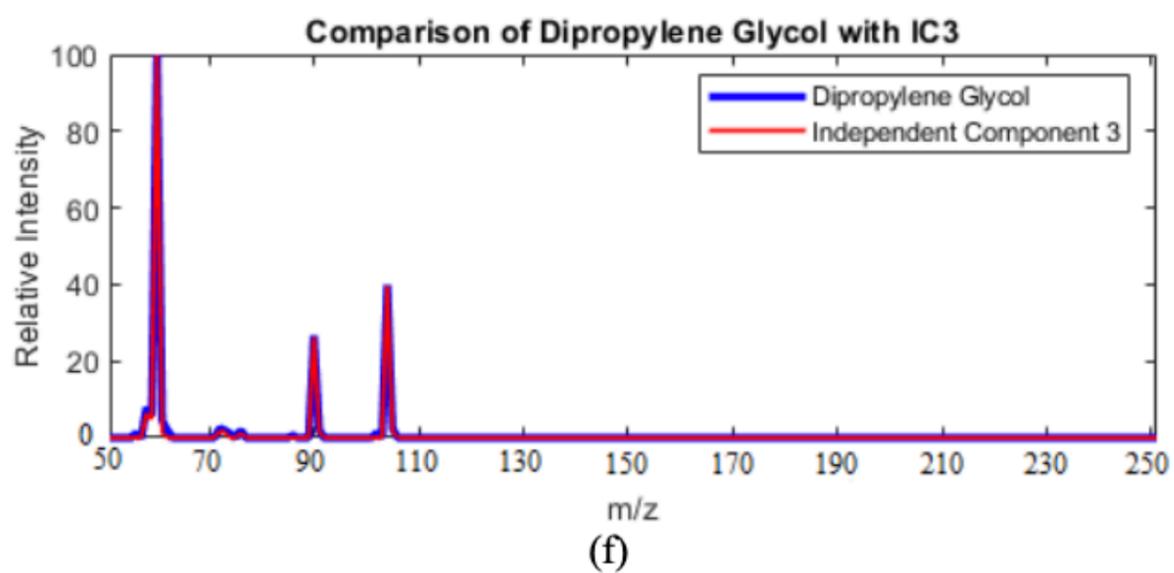
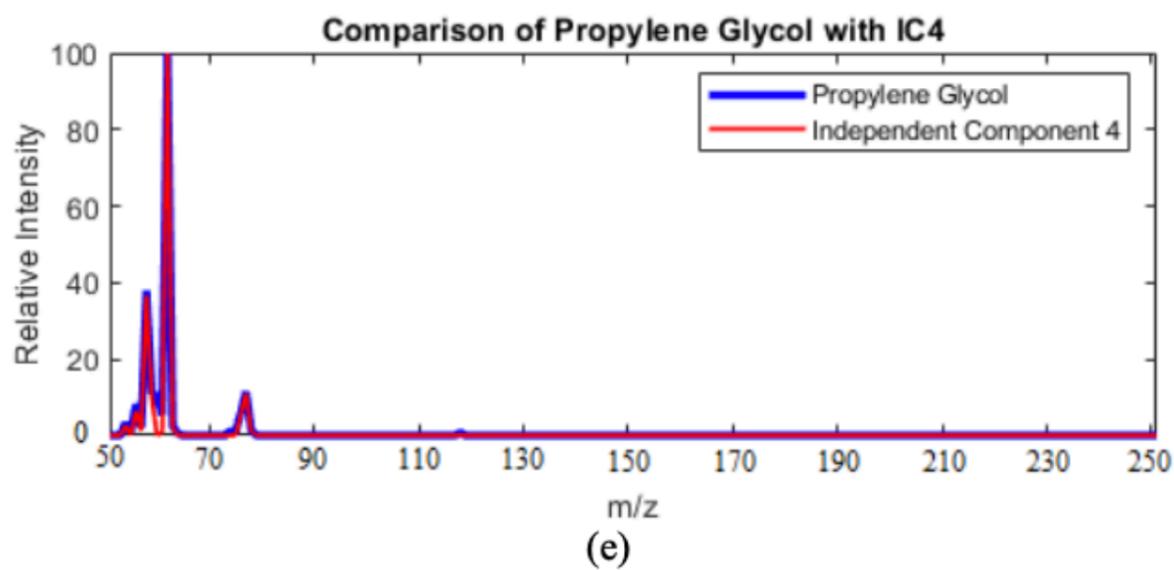
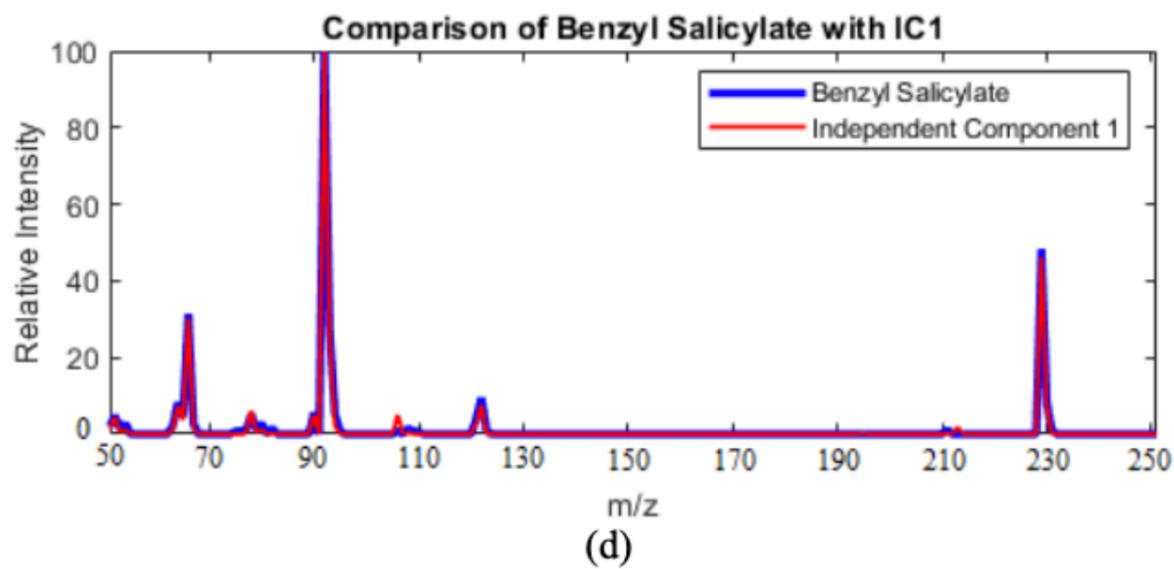


図3. 独立成分のマススペクトルとそれに対応する元のデータ。(a) ICA を通じて取得した独立成分(ICs)、(b) orange sweet と IC2、(c) benzyl benzoate と IC6、(d) benzyl salicylate と IC1、(e) propylene glycol と IC4、(f) dipropylene glycol と IC3、(g) octanoic acid と IC5