

# 1. 高分解能質量分析計を用いた水質異常原因物質の特定における 直交部分的最小二乗判別分析の有効性検証

山田 圭一  
中野 耕太  
今中 壮一

**要旨：**高分解能質量分析計を用いたノンターゲットスクリーニング分析は、水質異常の原因物質を特定する有効な手法のひとつであるが、分析データの解析操作が難解かつ煩雑であるため、解析者の経験や技量によって得られる結果が異なる可能性がある。このため、多変量解析の一種である直交部分的最小二乗判別分析法に基づいた解析方法の標準化を試みた。本調査で確立した解析方法を実際に発生した水質異常事例に適用したところ、水質異常原因物質の特定に加え、本解析法の有効性を検証できたことから、今後の水質異常発生時に大いに活用できるものと考えられた。

## 1. はじめに

水質異常時の対応については、平成15年10月10日付で厚生労働省健康局水道課より発出された通知<sup>1)</sup>の中で、水質基準を超過した場合や基準値超過の継続が見込まれる場合の措置等が示され、迅速な原因究明対応が求められている。また、平成24年5月に発生した利根川水系の浄水場で水道水質基準を上回るホルムアルデヒドが検出された事例<sup>2)</sup>を受けて、平成25年3月に厚生労働省から「水道水源における水質事故への対応の強化について」が通知された<sup>3)</sup>。本通知では、水質事故時の水質監視については、原因物質に応じて迅速性を重視した分析法等により効果的に実施する旨が記載されているものの、水質異常原因物質の特定は困難を極めることが多い。高分解能質量分析計によるノンターゲットスクリーニング分析<sup>4),5)</sup>は、水質異常原因物質の特定に有効な手法のひとつであるが、数百から数千種類の物質群から水質異常の原因物質のみを抽出する必要があり、解析が非常に困難になる場合が想定される。このため、原因物質の分析方法だけでなく、得られたデータの解析方法を確立することも極めて重要である。

本市では、水質異常時における迅速な原因物質の特定を目的として液体クロマトグラフ高分解能質量分析計(LC-HRMS)を用いたノンターゲットスクリーニングによる微量有機物の網羅的分析法の開発に向けた調査研究に取り組んでおり、ボルケーノプロット(2群間差比較)や著者らが考案した“2群間差対比較”を実際に発生した水質異常の試料に適用し、水質異常原因物質を特定できることを示した<sup>6)</sup>。しかしながら、これらの手法は2群間差の比較に基づくものであるため、試料が6検体あった場合には15(=  $6C_2$ )通りの組み合わせを比較する必要がある。したがって、測定試料が多数あった場合には解析操作が煩雑になり、解析者の観点が異なることで、同一の解析結果が得られない可能性も考えられた。

そこで、解析者の経験や技量の違いによらず、同一の解析結果が得られるようにするため、より高度な多変量解析の一種である直交部分的最小二乗判別分析(以下、判別分析)<sup>5),7)-10)</sup>の適用を試みた。既知物質を添加し調製した模擬試料をLC-HRMS法によるスクリーニング分析を実施し、判別分析の有効性を検証するとともに、既報<sup>6)</sup>に示した実際の水質異常事例を対象として判別分析を行い、標準化された操作によって多数の試料中から水質異常原因物質を簡便かつ迅速に特定できるかを検証した。

## 2. 調査方法

### 2.1 前処理方法および分析条件

分析試料の前処理方法および分析条件は既報<sup>6)</sup>の通り、LC-HRMSとして高速液体クロマトグラフィーオービトラップ型質量分析計(LC-Orbitrap MS)を用い、疎水性有機化合物を対象とした逆相C18カラムを用いた従来分析法(positive, negativeモード)、逆相カラムでは保持が難しい又はESIイオン化法では検出が難しいアルデヒド類やケトン類を対象としたDNPH誘導体化法(negativeモード)及びアミン類やアルコール類を対象としたFMOC誘導体化法(positiveモード)により分析を行った。DNPH化試薬とFMOC化試薬の化学構造を図-1に示す。

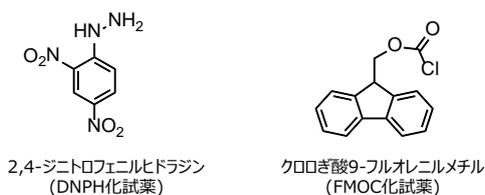


図-1 DNPH 試薬と FMOC 試薬の化学構造

## 2. 2 測定対象試料

### 2. 2. 1 模擬試料

降雨等の影響を受けず安定的な水質を示した二日間の本市柴島浄水場の原水及び浄水試料のうち、一日目の試料を水質異常前の平常時想定試料とした。また、二日目の試料へ既知物質を添加し水質異常想定試料を調製した。添加物質は、本市浄水場が水源としている淀川上流域に所在する工場排水から高濃度で検出される物質である 4,4'-ヘキサメチレンビス (1,1-ジメチルセミカルバジド) (HDMS、N-ニトロソジメチルアミン前駆物質)、ε-カプロラクタム (工業原料)、淀川原水から定期的に検出される農薬であるイブフェンカルバゾンの3物質とした。平常時想定試料は一日目の原水試料A、浄水試料A及び、二日目の原水試料B、浄水試料Bとし、水質異常想定試料は原水試料C、浄水試料Cとした各1検体の計6検体を測定対象試料とした。模擬試料の一覧を表-1に示す。

表-1 模擬試料の一覧

採水日	一日目		二日目			
	原水 試料A	浄水 試料A	原水 試料B	浄水 試料B	原水 試料C	浄水 試料C
物質添加	なし (平常時想定試料)				あり (異常時想定試料)	

### 2. 2. 2 水質異常試料

他水道事業体において発生した水質異常事例<sup>6)</sup>のTOC濃度と臭気試験結果を表-2に示す。水質異常当日の原水から4.4 mg/L、当日の浄水から6.9 mg/LのTOCが検出され、さらに、これらの2試料から甘味臭が認められたことから、これら水質異常試料とした。(以降、X日の浄水試料を「X日浄水」、原水試料を「X日原水」と表記)。

表-2 TOC濃度と臭気試験結果

採水日	前日		当日		翌日	
	原水	浄水	原水	浄水	原水	浄水
TOC (mg/L)	2.3	0.9	4.4	6.9	2.9	1.3
甘味臭	なし	なし	弱	強	なし	弱

## 2. 3 解析方法

分析データの解析には既報<sup>6)</sup>に示した通り、LC-HRMS分析によって得られたデータをCompound Discoverer 3.2 (Thermo fisher Scientific)を用いて解析し、得られた各物質の面積値を多変量解析ソフトウェアSIMCA 15.0 (Sartorius Stedim Data Analytics AB)に取り込み、データの標準化(平均0、分散1)による前処理をした後、判別分析を行った。なお、濃度の定量については、質量許容差を5 ppmとし、Free Style 1.6 (Thermo fisher Scientific)を用いて解析を行った。

## 2. 4 判別分析の水質異常への活用

判別分析とは、複数のグループに分類されているデータを基に、それらが「どのような基準(要因)で分類されているか」という関係を解析する手法であり、質量分析計で測定したデータを用いると、サンプル間の違いやサンプル特有の物質を座標に置き換え視覚化することができる。水質異常試料の判別分析による解析の概要を図-2に示す。本調査では目的変数Yとして「各試料の水質異常の有無」、説明変数Xとして「各試料から検出された物質ごとの面積値」を用いており、各試料の水質異常の有無(目的変数Y)の情報を基に、検出された物質(説明変数X)の中から水質異常のある試料群に特徴的な物質の抽出を目的としている。図-2に示したLC-HRMS面積値の表は、説明変数Xである各試料から検出されたn個の物質のLC-HRMS面積値を表している。また、目的変数Yである水質異常の有無の表は、官能評価や分析装置、各種水質監視装置等から得られた各試料における水質異常の有無を表している。これらのXの情報とYの情報を用いて判別分析を行うことで、図-2の右に示しているスコアプロット、ローディングプロット及びVIP(変数重要度、Variable Importance in the Projection)順位表が出力される。

判別分析とは、複数のグループに分類されているデータを基に、それらが「どのような基準(要因)で分類されているか」という関係を解析する手法であり、質量分析計で測定したデータを用いると、サンプル間の違いやサンプル特有の物質を座標に置き換え視覚化することができる。水質異常試料の判別分析による解析の概要を図-2に示す。本調査では目的変数Yとして「各試料の水質異常の有無」、説明変数Xとして「各試料から検出された物質ごとの面積値」を用いており、各試料の水質異常の有無(目的変数Y)の情報を基に、検出された物質(説明変数X)の中から水質異常のある試料群に特徴的な物質の抽出を目的としている。図-2に示したLC-HRMS面積値の表は、説明変数Xである各試料から検出されたn個の物質のLC-HRMS面積値を表している。また、目的変数Yである水質異常の有無の表は、官能評価や分析装置、各種水質監視装置等から得られた各試料における水質異常の有無を表している。これら

の X の情報と Y の情報を用いて判別分析を行うことで、**図-2** の右に示しているスコアプロット、ローディングプロット及びVIP (変数重要度、Variable Importance in the Projection) 順位表が出力される。

スコアプロットの各点は試料A~Fを表しており、目的変数 Y を横軸にとることで、横軸の正領域に水質異常試料群、負領域には水質異常の無い試料群がプロットされる。また、縦軸はLC-HRMS 面積値 (説明変数 X) のみを用いて試料間の違いを識別する軸であり、検出される物質の差異によって分離される。一方、ローディングプロットの各点は検出された物質 X<sub>1</sub>~X<sub>n</sub>を表しており、スコアプロットの縦軸及び横軸と対応している。横軸が各物質の水質異常の有無への寄与率であり、正方向に大きい程、水質異常試料群に多い物質であり、負の方向に大きい程、水質異常の無い試料群に多い物質であると考えられる。VIP 順位表は、試料A~Fから検出された物質 X<sub>1</sub>~X<sub>n</sub>のVIP値を示したものであり、VIP値が高い物質は、水質異常の有無と相関が高いと考えられる。また、一般的にVIP値が1以上であれば、目的変数と相関が高いとされている<sup>11)</sup>。例えば、**図-2**の表中に示すように、試料A及びBに水質異常があった場合、判別分析のスコアプロットでは横軸の正方向に試料A及びBがプロットされる。また、スコアプロットの試料A及びBと同じ領域にプロットされる点をローディングプロットから探し出すと、物質 X<sub>3</sub>がプロットされていることが読み取れる。次に、VIP順位表においてVIP値が高いほど水質異常の識別に寄与している物質であることから、物質 X<sub>3</sub>が上位に出力されていれば、X<sub>3</sub>は水質異常原因物質の有力な候補として考えることができる。このように、試料を2群 (=水質異常の有無) に分けて、両者を識別する物質 (=物質 X<sub>3</sub>) を抽出する解析手法が判別分析である。

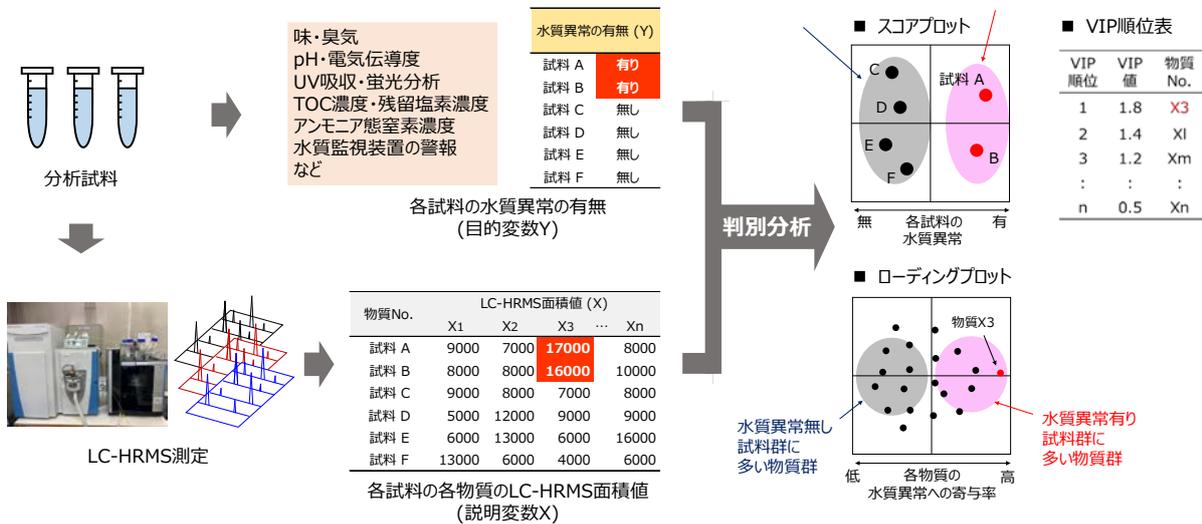


図-2 水質異常試料の判別分析による解析の概要

### 3. 結果および考察

#### 3. 1 判別分析の有効性検証

水質異常事例へ活用する前に、判別分析の有効性検証を行った。平常時想定試料である原水試料 A、B 及び浄水試料 A、B に加え、3種の既知物質を添加し調製した水質異常想定試料である原水試料 C 及び浄水試料 C、各 1 検体の計 6 検体を LC-HRMS でスクリーニング分析し、添加物質の抽出を試みた。測定方法は従来分析法の positive モードで測定を行い、得られたデータを Compound Discoverer により解析を行ったところ、6 検体から計 135 物質が検出された。各試料から検出された物質の面積値を SIMCA へ取り込み、群間成分数 1、群内成分数 2 で判別分析を行った結果、決定係数 R<sub>2</sub> は 0.9973、予測性能 Q<sub>2</sub> は 0.8929 であった。R<sub>2</sub> は 0.65 以上、Q<sub>2</sub> は 0.5 以上であれば良好な予測モデルであるとされているため<sup>11)</sup>、精度の高いモデルが構築されたと考えられた。解析結果のスコアプロットを**図-3(a)**に、ローディングプロットを**図-3(b)**に、VIP 順位表を表-3に示す。スコアプロットの各点は試料を示しており、横軸の負領域には平常時想定試料である原水試料 A、B 及び浄水試料 A、B が、正領域には水質異常想定試料である原水試料 C 及び浄水試料 C がプロットされた。また、縦軸は検出される物質の面積値 (説明変数 X) の差異のみによって分離される軸であるため、今回の試料では正領域には原水試料 A、B、C、負領域には浄水試料 A、B、C がプロットされた。したがって、横軸では水質異常の有無について、縦軸では原水と浄水に含まれる物質の差異によって分離されたと考えられる。一方、ローディングプロットの各点は検出された物質であり、スコアプロットの縦軸及び横軸と対応しているため、ローディングプロットの横軸の正領域には水質異常想定試料に特徴的な物質が、負領域には平常時想定試料に特徴的な物質がプロットされ、縦軸の正領域には原水試料に特徴的な物質が、負領域には浄水試料に特徴的な物質がプロットされる。したがって、ローディングプロットにおいて、横軸の正方向の座標が最も大きいプロットに着目し解析を行ったところ、水質異常想定試料に含まれる HDMS、ε-カプロラクタム、イプフェンカルバゾンの 3 物質が検出されたこと

から、本法を解析に用いることで水質異常原因物質の抽出が可能と考えられた。

表-3は、検出された各物質のVIP値上位5物質を列挙したものであるが、VIP値は各物質の面積値（説明変数X）の水質異常の有無（説明変数Y）への寄与の大きさを表していることから、これらは水質異常想定物質添加の有無に大きく寄与している物質と考えられる。また、因子負荷量はローディングプロットの横軸に対応しており、正に大きい程水質異常想定試料に特徴的な物質、負に大きい程平常時試料に特徴的な物質であることを示していることから、横軸の正方向に大きく（因子負荷量が正に大きい）かつVIP値が高い物質が水質異常原因物質であると考えられる。本検討におけるVIP値上位3物質に3種の添加物質が出力されており、4位以降は因子負荷量が負の値又はVIP値が上位3種と乖離していることから、上位3物質が水質異常原因物質であると判断することができた。これらの結果から、判別分析は水質異常原因物質の特定に有効であると考えられた。

このように、LC-HRMSによる測定で得られたデータに対して、判別分析を行うことで試料群間を比較し、ある試料群に特徴的な物質の特定が可能となり、本手法は水質異常原因物質の特定に活用できると考えられたため、過去に発生した水質異常事例に適用し、有効性を検証した。

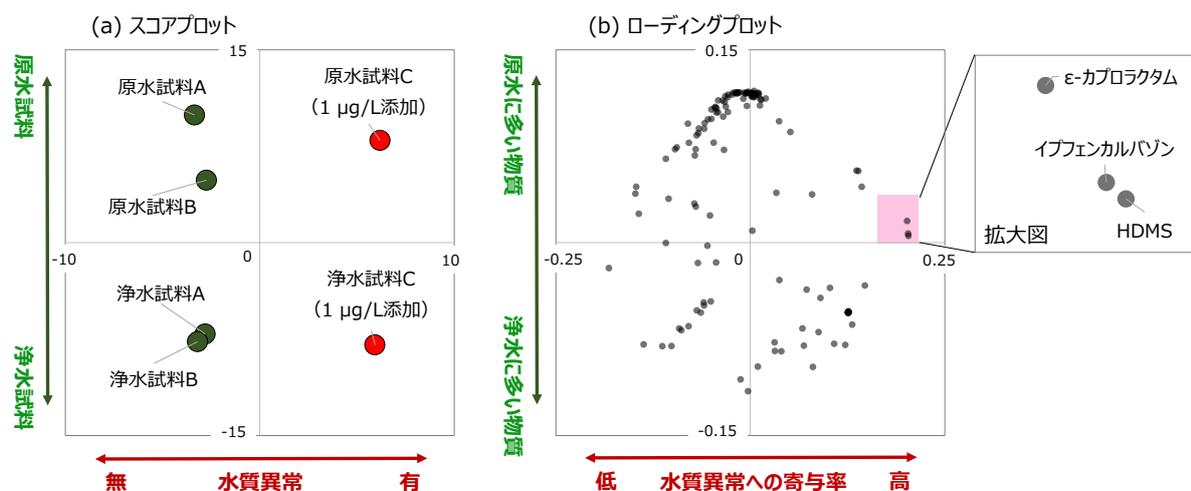


図-3 判別分析の (a) スコアプロット及び (b) ローディングプロット

### 3. 2 判別分析の水質異常事例への応用

表-2に示した他事業体において発生した水質異常発生日の前日、当日、翌日の原水、浄水計6試料を対象に、従来分析法のpositive、negativeモード、DNPH誘導体化法及びFMOC誘導体化法の3法で測定した結果をCompound Discovererで解析したところ、合計395物質が検出された。これらの物質の面積値データのみをSIMCAへ取り込み、主成分分析<sup>5), 8), 12)</sup>を実施したが、水質異常原因物質の特定には至らなかった。このため、「面積値データ」を説明変数X、「水質異常の有無」を目的変数Yとして、判別分析による水質異常原因物質の特定を試みた。群間成分数1、群内成分数2で判別分析を行った結果、 $R_2$ は0.9997、 $Q_2$ は0.6699であり、**3. 1 判別分析の有効性の検証**と同様に精度の高いモデルが構築されたと考えられた。解析結果のスコアプロットを図-4(a)に、ローディングプロットを図-4(b)に、VIP値が高い上位5物質を抽出したVIP順位表を表-4に示す。なお、図-4(b)で示すローディングプロットの各物質に割り当てている番号は、VIP順位の番号となっている。

スコアプロットの横軸の正領域には当日原水及び当日浄水、負領域には前日原水、前日浄水、翌日原水及び翌日浄水がプロットされた。また、縦軸の正領域には3種の原水試料、負領域には3種の浄水試料がプロットされた。つまり、**3. 1 判別分析の有効性の検証**で示した事例と同様に、横軸では水質異常の有無によって、縦軸では原水と浄水に含まれる物質の差異によって分離されたと考えられる。

表-3 VIP順位表

VIP順位	VIP値	因子負荷量	物質名
1	1.92	0.203	HDMS
2	1.91	0.203	イブフェンカルバゾン
3	1.90	0.202	ε-カプロラクタム
4	1.72	-0.182	C8 H4 O3
5	1.46	0.147	C17 H27 B O2
:	:		
135	0.29		

また、スコアプロットを基にローディングプロットを解析すると、横軸の正領域には水質異常試料に特徴的な物質群、横軸の負領域には異常の無い試料に特徴的な物質群、縦軸の正領域には原水試料に特徴的な物質群、縦軸の負領域には浄水試料に特徴的な物質群がプロットされていることがわかった。このことから、ローディングプロットにおいて、横軸の正方向に値が大きい赤四角の領域に存在する物質群を水質異常原因物質の候補として考えた。VIP 値の高い順に物質番号を付与して、物質の詳細を調べると物質 No. 5 は従来分析法で、物質 No. 1、3、4の3物質はDNPH 誘導体化法で、物質 No. 2はFMOC 誘導体化法で検出された物質であり、これらの計5物質はローディングプロットで示した赤四角の領域の物質群に含まれていた。したがって、実際に発生した水質異常時においても、判別分析に基づく標準化された解析方法により VIP 値が高い物質を水質異常原因物質の候補として適切に抽出されると考えられた。

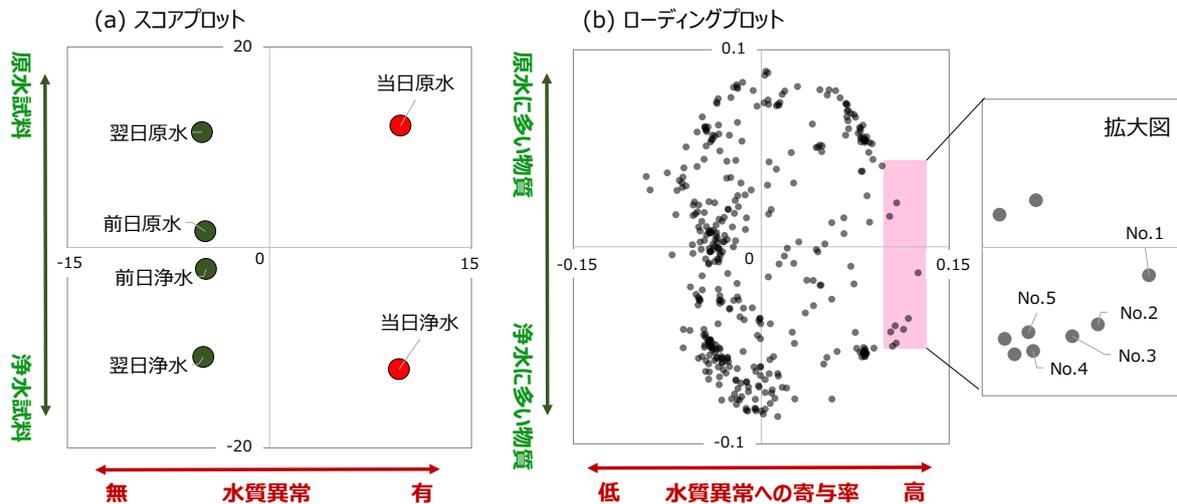


図-4 水質異常事例の (a) スコアプロット及び (b) ローディングプロット

表-4 水質異常事例のVIP 順位表

VIP順位 (物質No.)	VIP値	因子負荷量	測定精密質量	推定組成式 (質量誤差)	誘導体化法	推定物質名	検出濃度 (当日浄水)
1	1.97	0.126	521.1027	C18 H18 N8 O11 ([M-H] <sup>-</sup> ) (+1.0ppm)	DNPH	2DNPH-3-デオキシグルコソ	0.1 µg/L
2	1.87	0.118	286.1435	C17 H19 N O3 ([M+NH <sub>4</sub> ) <sup>+</sup> ) (-1.0ppm)	FMOC	FMOC-エタノール	9.2 mg/L
3	1.82	0.114	223.0475	C8 H8 N4 O4 ([M-H] <sup>-</sup> ) (+0.9ppm)	DNPH	DNPH-アセトアルデヒド	52 µg/L
4	1.75	0.108	267.0739	C10 H12 N4 O5 ([M-H] <sup>-</sup> ) (+1.5ppm)	DNPH	DNPH-C4H8O2	-
5	1.72	0.107	249.0968	C10 H16 O7 ([M+H] <sup>+</sup> ) (-0.4ppm)	-	C10H16O7	-

### 3. 3 抽出された物質の構造推定

VIP 順位表及びローディングプロットで抽出された5物質中の3物質の構造については、既報<sup>6)</sup>に示した通り、物質No. 1、2、3がそれぞれ、2DNPH-3-デオキシグルコソ、FMOC-エタノールアンモニウム付加体及びDNPH-アセトアルデヒドと同定されており、各物質の濃度は3-デオキシグルコソが0.1 µg/L、エタノールが9.2 mg/L、アセトアルデヒドが52 µg/Lと推定される。そこで、本調査では、構造推定がなされていないDNPH 誘導体化法の物質 No. 4及び従来分析法の物質 No. 5を対象に調査することとした。物質No. 4は、測定精密質量が  $m/z$  267.0739であることから、 $C_{10}H_{12}N_4O_5$  (計算精密質量  $m/z$  267.0735 ([M-H]<sup>-</sup>)、不飽和度7)が組成式の候補の一つとして考えられた。窒素原子と酸素原子の数から、この物質は1分子のDNPHが付加して生成されたものと推測された。組成式から1分子のDNPHの組成を差し引くことで、誘導体化される前の物質の組成式を算出したところ、C4H8O2の組成式が導き出された。不飽和度が1であり一つのカルボニル基を有する考えられたため、ヒドロキシアルデヒド類又はヒドロキシケトン類であると仮定し、化学構造をリストアップしたところ、複数の構造が考えられた。その推定構造を図-5に示す。8種の構造異性体の化学構造が挙げられたが、8種の全ての異性体は市販されておらず、標準物質を入手することが困難であったため、この物質を特定するに至らなかった。物質No. 5は測定精密質量が  $m/z$  249.0968であることから  $C_{10}H_{16}O_7$  (計算精密質量  $m/z$  249.0969 ([M+H]<sup>+</sup>)が組成式の候補の一つとして考えられた。しかしながら、炭素鎖10のアルカン構造だけでも75種の構造異性体が考えられ、さらに不飽和度と酸素原子を考慮すると、無数の構造異性体が挙げられ、これらの標準物質を入手することは困難であったため、この物質を特定す

るに至らなかった。

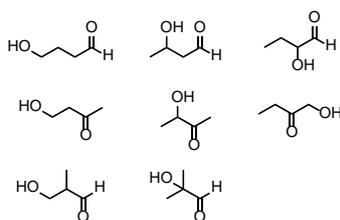


図-5 組成式 C<sub>4</sub>H<sub>8</sub>O<sub>2</sub>の推定構造

### 3. 4 判別分析の有効性

本調査では、実際に発生した水質異常の試料から、判別分析によってVIP順位上位5物質を水質異常原因物質候補として抽出し、そのうち上位3物質については3-デオキシグルコソン、エタノール及びアセトアルデヒドと特定することができた。この結果は、既報<sup>6)</sup>に示した従来のボルケーノプロットや“2群間差対比較”による解析結果と同等であり、判別分析により解析過程を標準化した本法を用いても水質異常原因物質の特定が可能であることが確認された。判別分析法は、解析者の経験や技量によらずVIP値やローディングプロットから同一の解析結果が得られるため、本法は水質異常原因物質の特定に有効な解析手段であると考えられた。

### 4. 結論

ボルケーノプロットのような2群間差比較は2試料間の差異を解析する手法であるが、本調査で使用した判別分析では2試料以上の多数の試料間でも容易に物質を抽出し、水質異常の原因物質候補の特定だけでなく、複雑な処理をすることなく迅速なデータ解析も可能となることが本調査で示された。また、解析方法を標準化することで、同一データから解析を行えば、解析者によらず、VIP値から同一の結果が得られるため、確度の高い水質異常原因物質の抽出が可能となることが確認された。本法を用いることで水質異常のある試料群に特徴的な物質を簡便かつ迅速的に特定することが可能となるため、本市のみならず、他事業体においても今後の水質異常発生時における水質異常原因物質の特定に大いに活用できると考えられた。

### 【参考文献】

- 1) 厚生労働省：水質基準に関する省令の制定及び水道法施行規則の一部改正並びに水道水質管理における留意事項について、平成15年10月10日付 厚生労働省健康局水道課長通知。
- 2) 小林憲弘、杉山直樹、久保田領志、野本雅彦、五十嵐良明：利根川水系の浄水場におけるホルムアルデヒド水質汚染の原因物質の特定、水道協会雑誌、81(7)、63-68 (2012)。
- 3) 厚生労働省：水道水源における水質事故への対応の強化について、平成25年3月28日付 厚生労働省健康局水道課長通知。
- 4) Hollender, J., Schymanski, E. L., Singer, H. P., and Ferguson, P. L.: Nontarget screening with high resolution mass spectrometry in the environment: Ready to go?, Environ. Sci. Technol., 51(20), 11505-11512 (2017)。
- 5) Wang, B., Wan, Y., Zheng, G., Hu, J.: Evaluating a tap water contamination incident attributed to oil contamination by nontargeted screening strategies, Environ. Sci. Technol., 50(6), 2956-2963 (2016)。
- 6) 山田圭一、中野耕太、今中壮一：誘導体化ノンターゲットスクリーニング法を活用した水質異常原因物質の特定、水道協会雑誌、92(11)、2-13 (2023)。
- 7) Yamamoto, S., Shiga, K., Kodama, Y., Imamura, M., Uchida, R., Obata, A., Bamba, T., Fukusaki, E.: Analysis of the correlation between dipeptides and taste differences among soy sauces by using metabolomics-based component profiling, J. Biosci. Bioeng., 118(1), 56-63 (2014)。
- 8) 大渡康夫、杉山万里、牧野正知、松林和彦、田畑光正：メタボローム解析を用いた食品成分の評価技術の確立(第2報) — 香气成分のメタボローム解析によるブドウ品種特性の顕在化 —、島根県産業技術センター研究報告、56、13-20 (2020)。
- 9) 岩佐悟、飛田啓輔、武田文宣、富田理、中村敏英：漬物の発酵に由来する香りの研究(第7報) 香味に寄与する水溶性成分の探索、茨城県産業技術イノベーションセンター研究報告、47、21-24 (2018)。
- 10) 玉田佳大、樺島文恵、櫻井昌文、徳井美里、山下伸雄、窪寺隆文、明石貴裕：ノンターゲットGC/MSによる清酒の「押し味」のモデル化、生物工学会誌、96(5)、234-239 (2018)。
- 11) Eriksson, L., Byrne, T., Johansson, E., Trygg, J., Vikstrom, C.: Multi- and megavariate data analysis, Basic Principles and Applications, 3rd Edition, UMETRICS ACADEMY, 89-115 (2013)。
- 12) 中野耕太、外山義隆、今中壮一：高分解能質量分析計を用いた淀川水系における微量有機物のスクリーニング調査、令和4年度水道研究発表会講演集、日本水道協会、638-639 (2022)。

本報告は、水道協会雑誌にて報告したものである。

(山田圭一、中野耕太、今中壮一：高分解能質量分析計を用いた水質異常原因物質の特定における直交部分的最小二乗判別分析の有効性検証、水道協会雑誌、93(4)、2-9 (2024).)