

論文題名 『RGB-スペクトル変換法によるスマートフォン画像を利用した比色分析法の開発』

「分析化学」第 69 巻第 12 号 693-706 ページ

著者名：稲川有徳¹，上原伸夫¹（¹宇都宮大学工学部）

2020 年「分析化学」論文賞として、上記の論文が選定されましたので、お知らせいたします。

【選定理由】ならびに「論文概要」

比色分析法のなかでもレシオメトリック検出は pH やイオン濃度の計測などに展開されており、化学分析の基礎をなしている。一般的に、レシオメトリック検出には波長分解能の高い分光光度計が用いられる。一方で、ベッドサイド診断や現場分析においてはポータブルな検出器および検出手法が求められている。近年では、分光器の代わりに RGB や L^*a^*b に代表される色彩情報を用いたスマートフォン画像による検出手法も開発が進められてきた。しかしながら、これらの色彩情報はセンサーの分光感度と計測光の分光スペクトルの積算値であり、化学的な情報は含まれない。そこで、コンピュータグラフィックスの分野におけるレンダリング技術を分光計測に展開できれば、分光器を用いることなく化学スペクトルを取得できるものと着想した。本論文ではこの概念の適用可能性を拡大するため、スマートフォン画像の RGB 値を用いた吸収スペクトルの再現手法を検討した。これにより、「分光装置を用いない分光計測」の可能性を追求した。

スペクトル再現の手法は以下のとおりである。標準試料のスペクトルをあらかじめ主成分分析 (PCA) によりスコアベクトルとローディングベクトルに展開し、RGB 値とスコアベクトルを線形変換する表現行列を算出する。そして、スペクトルが未知である試料の画像の RGB 値を表現行列によりスコアベクトルに変換し、ローディングベクトルとの線型結合によりスペクトルを再現する。本論文では、フェノールレッド水溶液、過マンガン酸カリウム水溶液、アルミニウム-エリオクロムシアニン R 水溶液のスマートフォン画像を RGB 解析し、上述の手法で吸収スペクトルを再現した。

RGB 値から分光情報を得るための手法はこれまでも数多く報告されているものの、実際のスペクトルに対して面積比にして 50 % 以上の誤差が生じていることから化学分析への利用は極めて困難であった。しかしながら、本論文の検討において同様の検討を行ったところ、誤差は最大でも 11.2 % であり、高いスペクトル再現性を有することが明らかになった。再現されたスペクトルでは、等吸収点も精度よく観測することが可能であった。このことは、本法は化学平衡も正確に表現できることを示しており、精緻なレシオメトリック検出にも耐えうる手法であることが実証された。

また、本手法の再現性の高さを実証するために、河川水の水質分析 (pH, COD_{OH} , 陽イオン界面活性剤) を行った。マトリックス効果が存在するものの市販の分光光度計や電極により得られた結果と同等であった。実試料に対しても適用可能であることから、環境分析で要求されているオンサイト分析に有用な技術となり得ることを証明した。

本論文の結果は、スマートフォン画像と数学的処理により分光装置を用いずとも簡易かつ精緻にレシオメトリックな検出が可能であることを示している。スペクトルに変換する際の表現行列やローディングベクトルをデータベース化できれば、例えばスマートフォンのアプリ機能に組み込むことができる。これにより、分光分析のハードルを低くすることに貢献し、オンサイト分析や教育現場など様々なシチュエーションにおけるスペクトルを用いた化学分析の展開が期待される。

委員会では慎重に審議・検討し、上記の理由により、本論文を 2020 年「分析化学」論文賞受賞論文に値すると認め、選定した。

〔「分析化学」論文賞選考委員会〕