



| | |
|--------------|---|
| Title | 分光計測における物質情報抽出最適化手法に関する研究 |
| Author(s) | 笹木, 敬司 |
| Citation | 大阪大学, 1986, 博士論文 |
| Version Type | VoR |
| URL | https://hdl.handle.net/11094/24562 |
| rights | |
| Note | |

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

| | |
|---------|-------------------------------------|
| 氏名・(本籍) | 笹木敬司 |
| 学位の種類 | 工学博士 |
| 学位記番号 | 第7267号 |
| 学位授与の日付 | 昭和61年3月25日 |
| 学位授与の要件 | 工学研究科 応用物理学専攻 学位規則第5条第1項該当 |
| 学位論文題目 | 分光計測における物質情報抽出最適化手法に関する研究 |
| (主査) | 教授 南茂夫 |
| 論文審査委員 | 教授 西田俊夫 教授 牧之内三郎 教授 一岡芳樹 教授 興地斐男 |

論文内容の要旨

本論文は、混合物の定性・定量的物質情報の抽出を目的とした分光データの新しい数学的処理法と多重分光画像処理法の開発、およびその応用に関する研究の成果をまとめたもので、緒論、本論6章、および総括からなっている。

緒論では、本研究の背景と本論文の概要を述べている。

第1章では、分光計測における従来の数学的手法の理論、およびそれらの実用上の問題点や課題について述べ、本研究の目的と意義を明らかにしている。

第2章では、混合物の定量分析を行う場合に、スペクトルの最適測定波長、または波長域を選択する手法を提案している。まず、推定成分量の平均二乗誤差に基づく選択規範を導出し、次に分枝限定法を利用した実用的選択アルゴリズムならびに測定波長数の最適化手法について述べ、実用分析に応用した結果から、測定波長数は成分数と同数で十分であることを示している。

第3章では、混合物の定性分析を目的として、複数の未知混合物スペクトルから各構成成分のスペクトルを分離推定する手法を提案している。また、この手法を用いて、クラウン化合物の化学反応過程における中間生成物のスペクトル推定を行い、その構造解析に利用した結果について述べている。

第4章では、多重分光画像処理の現状、および分光計測における処理法との関連性について概説し、多重分光画像からスペクトル情報を利用して観測領域内に混在する複数の物質の各空間分布パターンを推定する手法について述べている。さらに、パターン推定の精度に基づき、多重分光画像測定を最適化する手法を提案している。

第5章では、画像内の成分物質の各分布パターンだけでなく各成分スペクトルも同時に推定すること

を目的とした多重分光画像の空間的定性・定量情報抽出法を提案し、実験によりその有効性を確認している。

第6章では、第5章で述べた手法の応用として、試作した顕微多重分光画像処理システムを用いてラットの肝臓内酵素活性化の解析を行った結果について述べ、組織化学分析への有用性を明らかにしている。

総括では、以上の研究成果をまとめるとともに、今後の研究課題についても言及している。

論文の審査結果の要旨

分光計測法は物質情報の取得に最も適した手段の一つとして古くから利用され、現在実用計測技術として定着している。しかし今日の高度技術時代を迎えて計測対象の増大と多様化は著しく、オンラインコンピュータを活用する科学計測の自動化と知能化、いわゆるラボラトリ・オートメーション(LA)への動きが活発化している。この様な趨勢の中で、科学計測の中心的位置を占める分光計測は、分光分析という実用上のニーズに支えられ、LA発展の先導的役割を果しつゝある。それにもかかわらず、物質情報抽出という最終目標を高精度・高能率で達成するため、コンピュータを情報の質向上に直結させようとする試みはあまり行われていない。本論文は、急速な進歩を遂げつつある小型コンピュータの数値処理能力を分光計測の知能化に向けて活用し、コンピュータを中心とした新しい計測形態を確立するための一連の研究をまとめたものであり、主な成果を要約すると次の通りである。

- (1) 混合物試料の定量分光分析において、従来から直感や経験で決められていたスペクトル測定波長や波長域を自動的かつ短時間で最適選択するため、組合せ最適化問題を基本とした新しいアルゴリズムを提案しその有効性を確認している。これは多数の波長点よりも選択された最小波長点を用いる方が定量精度が高いという、従来の定説を覆す結果を生み、分光分析分野で大きな反響を呼んでいる。
- (2) 混合物の定性情報の抽出を目的として、複数の未知混合物スペクトルから各構成成分のスペクトルを推定するための、主成分分析法を基本とした新しい手法を考案し、化学反応過程における中間生成物の解析に応用してその有効性を実証している。この方法はライブラリを全く使わず、成分量未知の混合物複数スペクトルから各成分スペクトルを高精度で推定できるという特長をもつ。
- (3) 多重分光画像が物質のスペクトル情報(定性的情報)と分布パターン情報(定量的情報)を持つことに着目し、多重分光画像内に混在する複数の物質の各分布パターンを推定するための新しい処理法を開発するとともに、(1)で述べた手法を画像に拡張し、成分パターン推定のための最適波長選択法を提案している。この手法は、インバース問題として扱うことのできる他の多くの例にも広く応用しうる特長をもつ。
- (4) 画像内の成分物質の各分布パターンに加えて、各成分スペクトルをも同時に推定することを目的とした、多重分光画像の空間的定性ならびに定量情報抽出法を考案し、シミュレーションによって有効性を明らかにするとともに、試作した顕微多重分光画像処理システムを用いたラットの肝臓内酵素活

性化の分析に適用して、その実用性を確認している。この方法は生物試料という物理・化学的に複雑な対象に最適であり、組織化学分析に強力な手段を提供するものである。

以上のように本論文は、分光研究における知能化計測法に関して多くの新しい提案を行うとともに、物質情報抽出のためのコンピュータ利用に関して貴重な指針を与えており、計測学、情報工学、分析化学の発展に寄与するところが大きい。よって本論文は博士論文として価値あるものと認める。