

空間的スペクトル分解法を用いた食品成分の分析手法

指導教員 北村 豊
粉川 美路

山下 剛史 (202021066)

1. 研究背景

食の安全性の保証に貢献する成分分析の手法には大きく分けて破壊的手法と非破壊的手法がある。破壊的手法は目的成分の分離・抽出によって精度・信頼性の高い分析が可能である。一方、煩雑な工程や廃液による環境への負荷から持続的とは言い難い。一方、全数検査などを目的とした非破壊的手法の代表である分光法では、複数成分が混在したスペクトルの情報からケモメトリクス手法などを用いて目的成分との間接的な相関関係を求め、分析を行う。非破壊・非侵襲という利点があるが、間接的という点で信頼性に課題がある。

本研究では、全く新しい分析手法である「空間的スペクトル分解法 (Spatially Factorized Spectroscopy; SFS 法)」の開発を目指した。本手法は、マイクロマッピングによって空間的に分離した成分の計測を行うハード面でのアプローチと、計測したデータ行列を純粋な成分のスペクトル情報に分離するスペクトル分解を行うソフト面でのアプローチからなる。手法開発の第一段階として、モデル系を用いた解析手法の確立を目指した。

2. 材料と方法

試料には、10~50 wt%に調製した大豆油と水の O/W エマルションを用いた。

計測には、分子振動による非弾性散乱を計測するレーザラマン分光光度計 (NRS-5100, JASCO Corporation) を使い、マッピング計測を行なった。マッピングは、10 μ m 間隔で 50 \times 50 点に対して行い、露光時間は 5 s/point に設定した。

大豆油 (FUJIFILM Wako Pure Chemical Corporation) と水の標準品の計測は、60 s の露光で 3 回積算した。

スペクトルデータの前処理には、ベースライン補正 4 条件、平滑化 4 条件、正規化 3 条件の組み合わせの合計 48 条件を用い、網羅的に解析を行なった。

3. 結果と考察

【マイクロマッピングによる空間的に分離した成分の計測】

まず、ミクロスケールでの計測によって空間的に分離した成分を計測できるのではないかと SFS 法のハード面での仮説を検証した。計測したマッピングデータと標準品の類似度の指標としてコサイン類似度を用いた。コサイン類似度は [-1, 1] の値をとり 1 に近いほど類似していることを示す。

大豆油成分と水成分の両方で類似度が 1 に近いスペクトルの存在を確認でき、マイクロマッピングによって空間的に分離した成分を計測できることがわかった。

【SFS 法による分解スペクトルの算出】

続いて、空間的に分離した成分の情報を用いて、スペクトル

分解を行うことによって、従来法よりも純粋な成分の情報に分解できるのではないかと SFS 法のソフト面での仮説を検証した。

マッピングデータのスペクトル分解 (=SFS 法) には多変量曲線分解交互最小二乗 (MCR-ALS) 法と、リモートセンシング (RS) 領域での解析で用いられる手法を用いた (それぞれ、SFS_MCR, SFS_RS)。従来法との比較のために、マッピングデータを平均化して擬似的に一点計測データを生成し、MCR-ALS を用いたスペクトル分解を行なった (Single_MCR)。三種類の手法で算出した分解スペクトルと標準品との類似度 (Fig. 1) より、SFS 法によって純粋に近い (標準品との類似度が高い) スペクトルに分解できることがわかった。3 種類の手法で算出した水の分解スペクトル (Fig. 2) からも、混合スペクトルである従来法では分解が不十分となり、大豆油のピークが混在している様子が確認され、SFS 法によって精度よく分解できることが明らかになった。

4. 総括

マイクロマッピングとスペクトル分解手法の掛け合わせである SFS 法を用いることで、計測スペクトルを従来法と比較してより純粋な成分の情報に分解できた。これによって非目的成分の情報を除去した、目的成分に対する直接的な解析を行える可能性が示唆された。

今後は、定量分析における計測領域の代表性の確保や、モデル系から実際の食品系への応用を行い、新たな食品成分分析手法である SFS 法の可能性を探求していきたい。

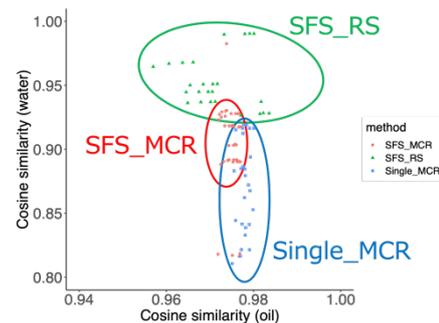


Fig. 1 三種類の手法で算出した分解スペクトルと標準品の類似度の散布図

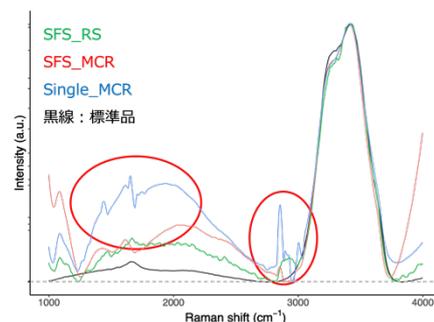


Fig. 2 三種類の手法で算出した分解スペクトル