

【研究区分：若手奨励研究】

研究テーマ：ノンターゲット分析と機械学習による「化学的環境雰囲気」評価モデルの構築	
研究代表者：生物資源科学部 生命環境学科 環境科学コース 助教 柳下真由子	連絡先：yagishita@pu-hiroshima.ac.jp
共同研究者：なし	
【研究概要】 本課題では、三次元蛍光スペクトル画像を機械学習によって判別させる手法を発展させ、常に変動を続ける環境試料を対象とし、環境中に放出される化学物質の微細な変化や差異を本法によって捉える手法について検討した。環境水試料に意図的に農薬の標準試薬を添加した試料と添加しない試料を調製し、その差異を本法で判別できるか検証したところ、高い精度で判別が可能であったが農薬を添加していないにもかかわらず添加有りと判定しているものが一部あり、それらは水試料に元々含まれていた農薬を検知している可能性があった。	

【研究内容・成果】

1. 研究目的

先行研究において最終処分場に搬入される廃棄物から得た抽出試料を、蛍光分光光度計の三次元蛍光スペクトルによるノンターゲット測定をし、得られたスペクトル画像を機械学習によって画像解析することで、廃棄物種（ばいじん、鉱さい、汚泥、粉じん、燃え殻）を判別するシステムを構築した。また、人為的に廃棄物試料に残留性有機汚染物質（POPs）を添加する試料と添加しない試料を調製し、それらの差異も同様に機械学習による画像判別ができるようになり、搬入時の迅速な廃棄物種検査への応用について検討した。

本課題では、この「ノンターゲット測定と機械学習による画像解析」の手法を大きく発展させるべく、常に変動を続ける環境試料を対象として、そこに上乘せされる気候や天候の変化、人間や生態系の活動、公害や災害の発生、漏出事故などの人為的非人為的な“イベント（環境事象）”の発生によって起こる、環境中に放出される様々な化学物質の微細な変化や差異である“化学的環境雰囲気”を本手法によって捉える手法について検討することを目的とした。

2. 研究方法

試料は緩速ろ過方式の浄水場施設の原水とろ過水、河川水試料に農薬標準試薬を添加と非添加のような予め差異が明らかな試料を用いた。

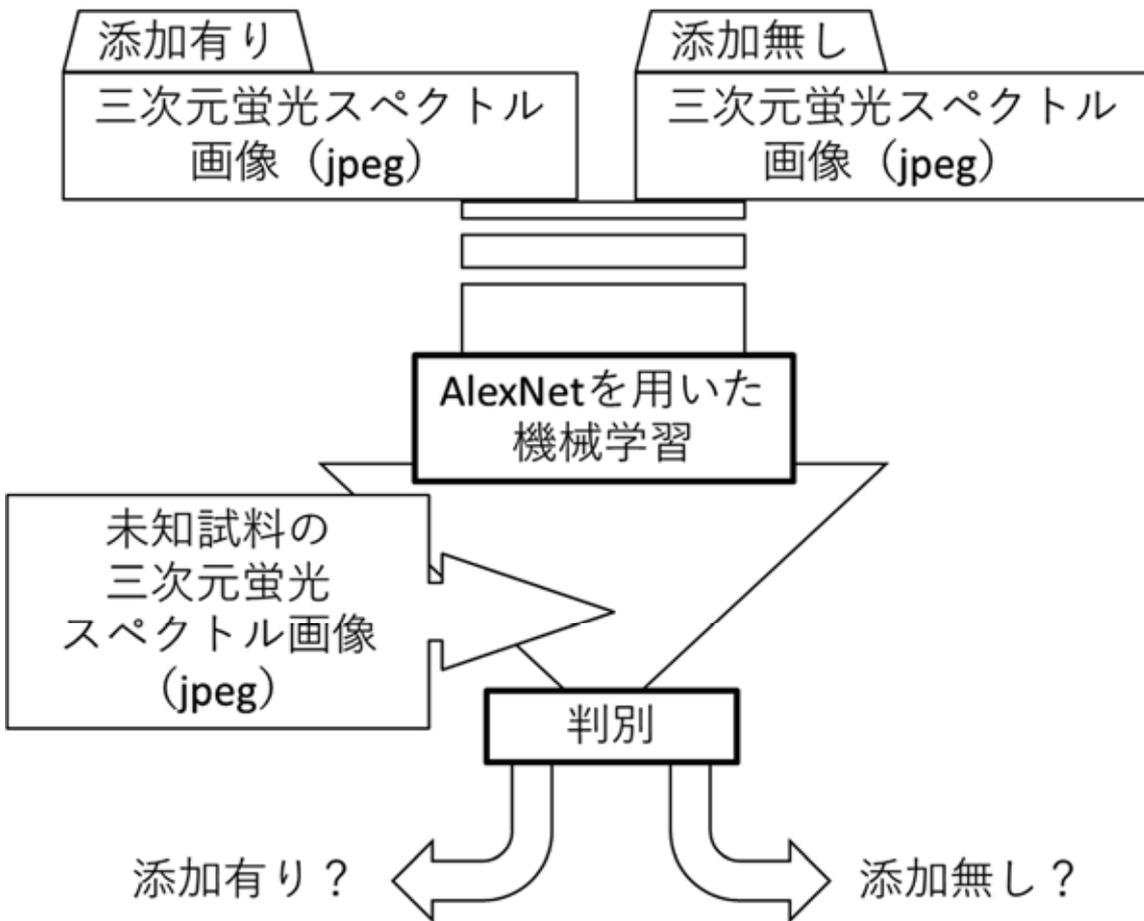
河川水試料は庄原市を流れる戸郷川の定点で2022年4月～10月に採取し二分した後、一方には農薬（水質管理目標設定項目 農薬一斉分析対応 28種混合標準液、富士フィルム和光純薬）の標準試薬を添加し、他方には添加しないという差異を付けた。それらの試料を簡易かつ迅速に液液抽出することが可能な迅速前処理法（木村ら、2014年）を用いて抽出および膜ろ過した。抽出液を蛍光分光光度計の三次元蛍光スペクトルモードで測定し、スペクトル画像を得た。

得たスペクトル画像はJPEG形式に加工し「原水」と「ろ過水」または「添加有り」と「添加無し」のラベル付けをした教師データとして、数値解析ソフトウェア MATLAB の、畳み込みニューラルネットワーク（Convolutional Neural Network (CNN)）による画像認識のモデルである AlexNet をアーキテクチャとして用いて機械学習させた。その後、教師データには含まれない未知のスペクトル画像を「原水」か「ろ過水」、「添加有り」か「添加無し」を判別するコードを組んだ。そして未知データといっても予め回答を把握しているため、その回答と一致するかどうかで正解率を算出した。

3. 研究成果

本研究では数値データではなく三次元蛍光スペクトルの「スペクトル画像」を用いて、機械学習による判別を検討している部分に新規性がある。本研究実施期間では緩速ろ過方式の浄水場試料について原水とろ過水の判別が可能となった他、河川から採取した環境水試料に意図的に農薬の標準溶液を添加した試料としない試料に分けて農薬を添加したことによる差を画像判別可能か検証した。その結果、農薬を添加していないにもかかわらず画像判別で農薬添加有りと誤解答するものがいくつか存在した。それらの試料について液体クロマトグラフ/飛行時間型質量分析計による測定を行ったところ、もともと高濃度に農薬が存在していたことが明らかになった。

機械学習による画像判別では教師データの数が数百のオーダーで必要と言われているが、実際に環境試料をそれほどの数採取するのは現実的ではない。しかし、本法では数十のオーダーでスペクトル画像を集積しそれらを複製することでも、数百のデータ数を集めた場合と同等の結果が得られたところである。一方で季節変動、日間変動など常に変動する環境試料を対象とする場合は数年スパンでこのようなデータ集積は必要になると考える。



4. 今後の発展

今後はいかにバリエーションに富んだ環境試料を定常的に採取するか検討する必要がある。バリエーションに富んだ環境試料を定常的に採取し、機械学習させることで変動はあるもののそれらを「幅のある平常時」と捉えることができる。それに対して、豪雨災害や津波などによる農薬や化学物質の漏洩を「平常時とは異なる＝異常」と検知できるよう研究を進めてゆく予定である。