

高感度ガス分析装置における分圧データのソフトウェア解析

Software analysis for the partial pressure using a high sensitive Quadrupole Mass Spectrometer

樺澤 匠、東城 裕樹、鶴岡 誠（東京工科大学）

Takumi Kabasawa, Hiroki Tojo, Makoto Tsuruoka (Tokyo Univ. of Tech.)

【背景・目的】 高感度のガス分析法として知られるガスマススペクトロメトリー（ガスマス）において、測定データは、各ガス成分の分圧と検出の位置情報という関係で得られる。さらに、あるガス成分（例えば CO₂ 等）について、主ピークと随伴ピークの複数のデータとなる。そこで一般に、分析する気体においては、混合しているガス成分種が多いほど特定のガス成分の分圧を求めることが困難になる。これは通常、経験者の目視にて求められるが、ソフトウェアにより自動で解析する試みもなされている。今回、多元連立方程式をソフトウェアにより解析するにおいて、数学的解法と物理化学的解法の 2 つの視点から検討したので報告する。

【方法】 ガス分析装置により検出された質量スペクトルのデータは、気体の分圧を計算して求める。この計算式は多元連立一次方程式であるため、行列により計算する。以下に検討した 2 つの解法の要約を示す。数学的解法： 未知数の少ない数式を選ぶことで行列式の不定や不能の可能性を減らし、一意となる解を得られやすくする。物理化学的解法： パターン係数が小さい値の式は測定装置のノイズに実測データが左右されやすくなる。このため、主ピークが要素にある数式を使い、随伴ピークも高い値のものを優先する。

【結果・考察】 今回の解析で使用するデータとして、パターン係数以外はすべて仮定した経

験（一般の大気に関するデータ）値を用いた（Table 1）。これを上記 2 つの解法で解析した結果、何れも同じであった。これは、測定におけるノイズを考慮しないからだと考えられた。

Table 1 大気成分

	大気成分
H ₂	0.00005%
H ₂ O	1.0%
CH ₄	0.00014%
CO	0.00001%
N ₂	78.088%
O ₂	20.949%
Ar	0.93%
CO ₂	0.04%

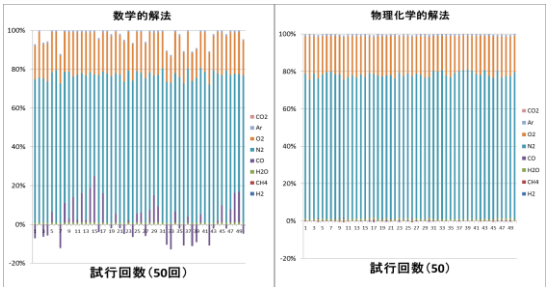


Fig.1 理論値を用いた計算結果

そこで、分圧式の実測値に乱数を掛け、ノイズが混入したと仮定しどのような変化が生じるか検討した。使用する乱数は、大気成分の理論値を 100%として、±5%、±10%、±20%の 3 種類を用意し、数学的解法と物理化学的解法についてそれぞれ 100 回実験を行った。Fig.1 に、±10%、実験回数 50 回のデータを示す。数学的解法では物理化学的解法に比べ、各成分の分圧に負の解析データが多数見られることがわかる。この結果、今回の検討では、物理化学的解法の方がより正確であるということがわかった。今後、大気や人体呼気における実測データを用いた解析を行う予定である。