

スペクトル解析における学習型アルゴリズムの利用について

青木宏道

株式会社デュナミスト

Examination of spectrum analysis with using learning algorithm

Hiromichi Aoki

DUNAMIST co. ltd. , E-mail: h_aoki@dunamist.uan.jp

1. 目的

スペクトル解析に於いては MLR や PLS などの最小二乗法によるものが主流であるが、最近では各種の学習型アルゴリズムの利用も積極的に検討されるようになってきている。本報告では最も基本的な誤差最急降下法によるニューラル・ネットワーク（NNW）を利用して定性及び定量解析を行った事例を基にそれらを実施した際の特徴的な結果を紹介する。

2. 方法

本検討ではスペクトルを構成する各 CH の値を NNW の初段への直接入力とし、その上層に8個の第二階層、最終的な出力となる1～4個の第三階層を設けた三層型の NNW 演算システムを構築しこれを用いてスペクトルの定性・定量解析を行った。

当該システムでは取り込んだ全データのうち任意数のデータ数のみをモデル作成に用い、残りのデータ(未知データ)に対して学習毎に検定評価を行うことで学習システムにおいて危惧されるオーバー・フィッティング(過剰学習)の発生を逐次監視する仕様とした。

2-1. 検討1・定量解析検討

検討1では NNW による脂肪含有量を目的変数とする定量解析を実施した。供試データはインタラクタンス計測ヘッドを装備した 512CH の分光デバイス(HPK・TG9405)によって取得された豚バラ肉と鳥ミンチ肉の近赤外スペクトルとなっている。目的変数は同サンプルを化学分析して求めた値となっており、同値を推定する定量アルゴリズムを NNW によって構築した。本件では NNW は入力層:512セル、中間層:8セル、出力層を1セルとした。(Figure 1)

また、NNW にある程度線形性のある動作をさせる試みとして、同一データに対する MLR 解析の結果選択された波長 CH に該当する NNW 演算ラインの重み係数(w)を事前に調整(加重)することで学習行程の誘導を試みた。

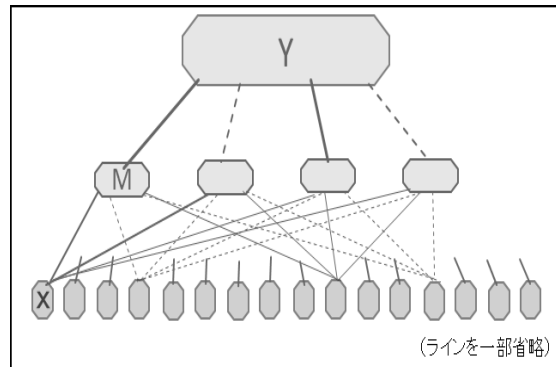


Figure 1. NNW configuration for FAT value analysis
(Input cell(X):512 cell, Mid cell(M):8, Output cell(Y):1)

2-2. 定量解析検討・結果

試行の結果、NNW による学習型アルゴリズムは一定の学習回数で最小二乗法による定量アルゴリズムと同等の定量値推定モデルを構築することができた。(Figure 2)

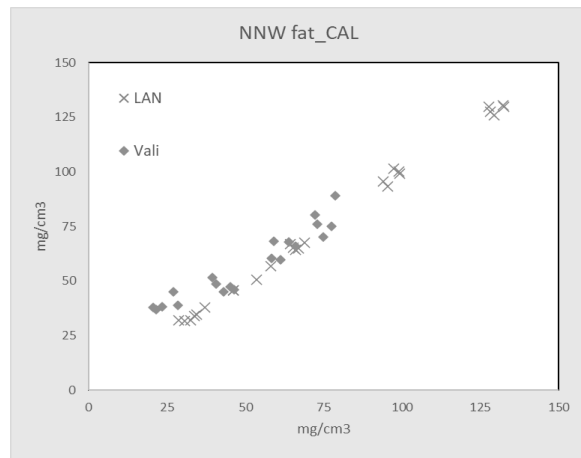


Figure 2. Analys result for FAT value with NNW
(LAN: R:0.998, SEC:4.16 Vali: R:0.949, SEP:5.49)

3-1. 検討2・定性解析検討

検討2では NNW による樹脂マテリアルの判別を行う定性解析を実施した。供試データは近接反射計測ヘッドを装備した 256CH の分光デバイス(HPK・RC11008)によって取得された4種:PE/PET/PP/PC の樹脂製品の近赤

外スペクトルとなっている。各サンプルは全て容器や各種部品として使用された物を用い、形状、表面粒度、塗装、汚れなどが様々な状態のサンプルを供試した。

本件等におけるNNWは入力層:256セル、中間層:8セル、最終出力層:4セルとして構築した。(Figure 3)

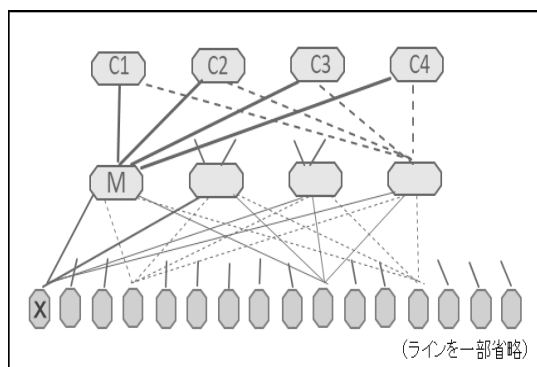


Figure 3. NNW configuration for resin discrimination
(Input cell(X):256 cell, Mid cell(M):8, Output cell(C):4)

また、同一のスペクトル・データに対して Table 1 に示す3パターンの教師データ(判別記号)提示し、それぞれについて解析(学習)を実施した。(Table 1)

Table 1. Pattern of symbols for 4 type discrimination

パターン 1	cell_1	cell_2	cell_3	cell_4
PE	●	○	○	○
PET	○	●	○	○
PP	○	○	●	○
PC	○	○	○	●
パターン 2	cell_1	cell_2	cell_3	cell_4
PE	○	●	○	○
PET	●	●	○	○
PP	○	○	○	○
PC	●	○	○	○
パターン 3	cell_1	cell_2	cell_3	cell_4
PE	●	○	○	●
PET	○	●	○	●
PP	●	●	○	○
PC	○	○	●	○

3-2. 定性解析検討・結果

試行の結果、NNW による学習型アルゴリズムは提示された3パターンの判別記号の全てに対して良好に学習を完了し判別機能を構築することができた。

パターン1においては4つの各出力セルの出力(0or1)によって4種樹脂の判別を行うことができた。(Figure 4)

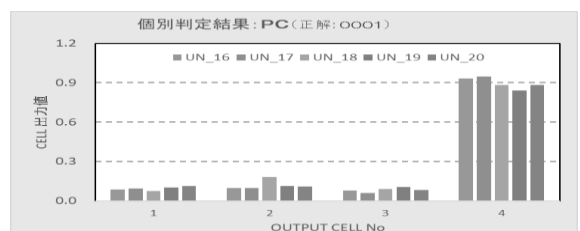
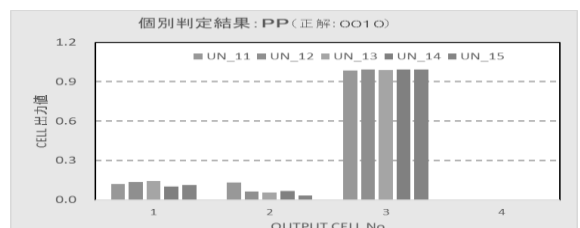
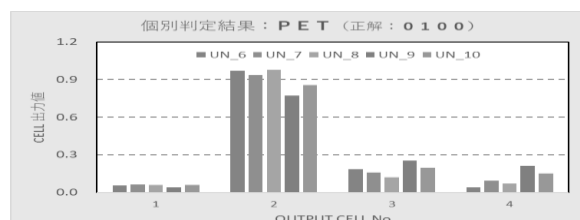
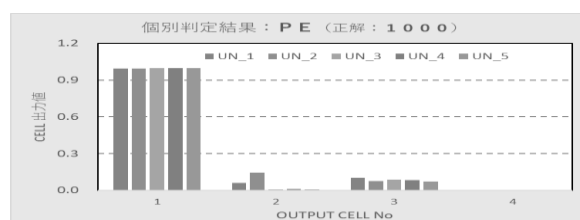
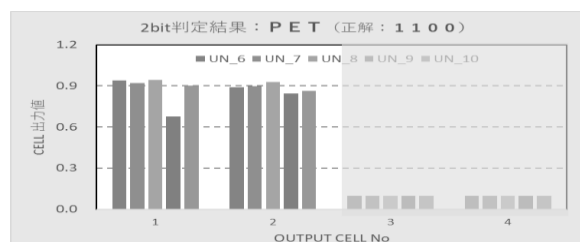


Figure 4. Discrimination result of resin with solid outputs

パターン2では4つの出力セルの内の2つだけを使用し疑似的に 2bit の出力を行いこれによる4種樹脂の判別を行った。出力セル1を第2bit、出力セル2を第1bit に見立ててそれぞれの出力(0or1)によって 2bit による4種判別(PP=10/PET=11/PP=00/PC=01)を可能にした。(Figure 5)



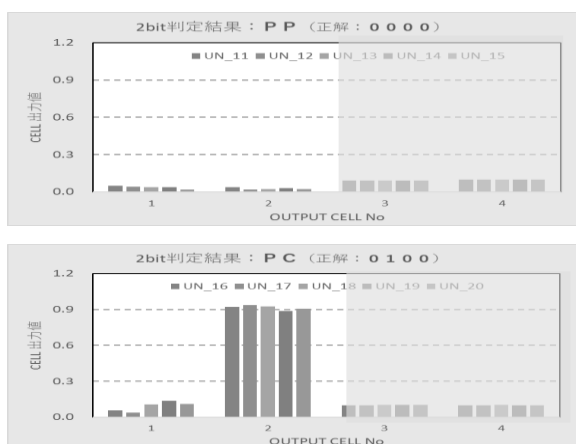


Figure 5. Discrimination result of resin with 2bit outputs

但し当該結果においては背反律による選択(NOT_00→11, NOT_01→10, 及びその逆相)が含まれる可能性を完全に排除することができない。

前述の疑義を解消する為、パターン3では4つの出力セルを層全て使いそれぞれの出力セルを疑似的に4bitの各bitに見立てて判別するように学習を行った。出力セル1を第4bit、出力セル2を第2bit、出力セル3を第2bit、出力セル4を第1bitに見立ててそれぞれの出力(0or1)の有無によって4bitによる4種判別を可能にした。(Figure 6)

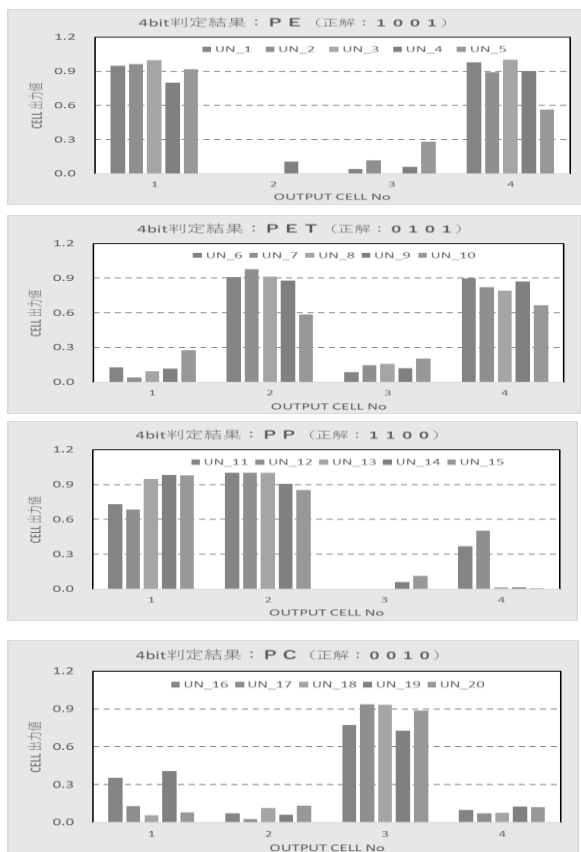


Figure 6. Discrimination result of resin with 4bit outputs

本結果では4つの出力パターン(表示される4bit値)には互いに逆相が存在しないため排他論理による判別はされていないことが確認でき、NNWがスペクトルの波形パターンに基づいて4種を判別していることが確認できる。

4. 結果のまとめ

(1)ニューラル・ネットワーク(NNW)による学習型のスペクトル解析用アルゴリズムを構築した。

(2)目的変数の直接的な推定を行う定量演算型のNNWを用いていて食肉中の脂肪量を推定する検証を行い、従来用いられている最小二乗法(MLR)と同等の結果を得ることができた。

(3)4つの出力を備えた定性解析用のNNWを用いて同時処理による4種樹脂マテリアルの判別を行った。同試行では同一のスペクトル・データに対して3つの異なるパターンの判別記号を用意し、それぞれ個別出力、2bit出力、4bit出力、が可能であることを確認した。

5. 考察

定量演算を行う場合、NNWは与えられた教師データに対して際限なくフィッティングを繰り返す為、過剰な適合(Over Fitting)に陥りやすい。また最小二乗法のように線形性が担保されないで学習データの与え方や事前の係数重み付けなどによりその動作をコントロールすることが重要になってくると考える。

定性解析に於いては従来の判別手法では複数の判別を行うには各対象に対する判別処理を階層的に行う必要であったが、NNWではこれを一括して行うことができるため成分毎の照合判定を繰り返すシステムよりも合理的な判別ができるものと考えられる。

線形性が事前に担保されている最小二乗法は非常に有効な解析ツールであるが、観測された事象の線形性が怪しい(データが歪んでいる、データが汚い)場合や線形性を持たない場合(抽象的、主観的な記号)などに対しては、NNWの方が合理的な結果を得られる可能性が高い。最小二乗法を補完する手段としてのNNWの可能性を今後も検討してゆきたいと考える。

参考文献

- 1) 溝口照康, 清原慎, 機械学習を活用したスペクトル解析, Isotope News No.764, 2019
- 2) 田中壮一郎, : 深層学習による分光反射スペクトルからの変質鉱物同定, 名古屋大学大学院環境学研究科地球環境科学専攻学位論文, 2019