

材質判別装置のための赤外線吸収フィルタ自動設計

Automatic design of infrared absorption filter for material discrimination device

野田 陽^{*1}

NODA Akira

^{*1}島津製作所 基盤技術研究所

Technology Research Laboratory, Shimadzu Corporation

We propose a method for discriminating materials from infrared reflected light using spectral filters optimized by a neural network. Normally, band pass filters focusing on a specific wavelength are used. However, the band pass filter is expensive. Therefore in this paper, we used organic materials which have complicated absorption spectrum as the filters. By optimizing the blending ratio of these organic material filters via the neural network, low-cost and lightweight material discriminating machines can be automatically designed. The accuracy (99.6%) equivalent to that of a neural net with infrared spectroscopic spectra was obtained in the task of discriminating whether a plastic piece containing impurities is PP (polypropylene) or non-PP.

1. Introduction

光学スペクトル等の測定次元間の独立性が高いデータにニューラルネットワークによる判別を用いる場合、Lasso や補助重み法 (AW 法)[野田 18] 等を用いることで入力次元を削減できる。例えば Fig.1 は PP, ABS, PS, PC 等からなる使用済み家電の混合プラスチック破砕片から得られる赤外線反射スペクトルを使って PP とそれ以外 (OTHER) に分類する全結合ニューラルネットワークを作成し、さらに AW 法を適用した結果である。4 本のピークのみが非ゼロであることから、4 つの波数 (波長) のみを観察すれば良い事が解る。

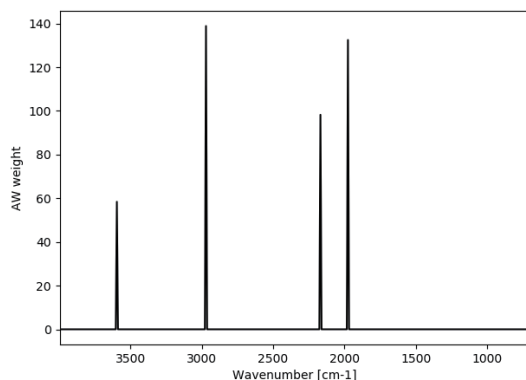


Fig. 1: AW 法による入力次元毎の寄与度

このように判別に使える波長が既知となるので、分光器を用いずとも特定波長のみを透過するバンドパスフィルタを用いることで軽量・安価に判別装置を作る事ができる [吉井 07]。しかしながら蒸着等の技術を用いて製造される高価な狭帯域の波長フィルタを多数用いると分光器に対する価格メリットは薄れていく。一方で特定の帯域を切り出すという観点では性能が劣るものの、着色料のように物質由来の透過率スペクトルそのものを用いるフィルタも数多く存在している。

本稿では物質の透過率スペクトル自体をフィルタに用いた分光判別装置の一例を示し、そのフィルタをニューラルネットを用いて最適化する手法について示す。

2. Device

Fig.2 に本稿におけるフィルタ型分光判別装置の模式図を示す。試料から反射された赤外光はフィルタを通過して検出器に入射する。このフィルタを切り替える事で、各フィルタを透過した光の強さを測定する。例えばここに狭帯域のバンドパスフィルタを AW 法で特定された寄与のある次元数だけ用意すれば、通常の分光分析スペクトルに AW 法を適用した場合と等価の信号処理になる。

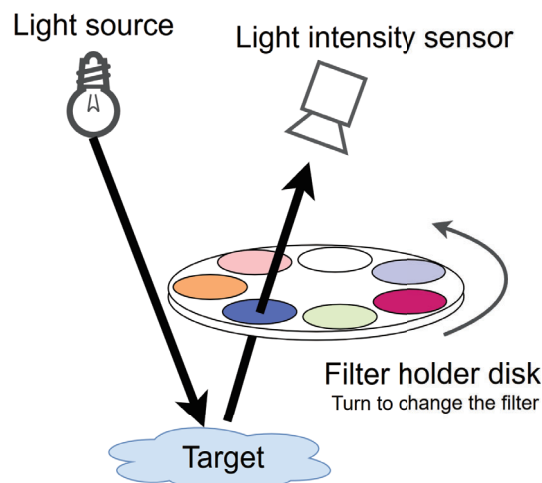


Fig. 2: フィルタ方式の分光判別器の模式図

本稿ではフィルタ原材料として、有機物 38 種^{*1}を用いた。

^{*1} 島津製作所製 赤外分光装置に標準添付のスペクトルライブラリから、樹脂を中心に右の物質を選んだ。ABS, Amorphous Nylon, Acrylonitrile Film1, Nylon 66, PE, PP, PS, Polyacetylene, Polybuten, Acrylonitrile Film2, PU, Soft PVC, EVA, EVOH, PVAL, PVDF, PTFE, EAA, FEP, Epoxy, Polyester, Silicon Oil, PI, CR, Silicon Rubber, HPC, POM, PAR, PEI, PEEK,

それらの吸光係数スペクトル *2 の例を Fig.3 に示す。

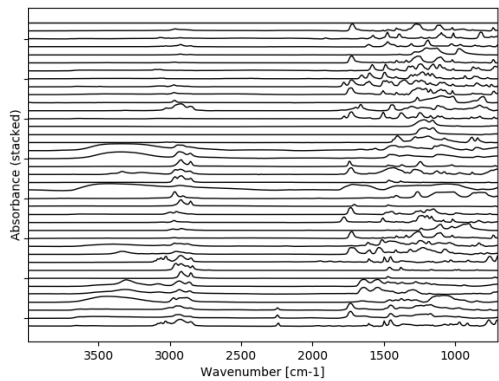


Fig. 3: フィルタ原材料 (38 種) 吸光係数

また試験片として三菱電機より提供された、使用済み家電の混合プラスチック破砕片 *3 を用いた。試験片のスペクトルは島津製作所製 樹脂識別装置 IRPF-100 を用いて取得した。参考までに試料の反射スペクトル例を Fig.4 に示す。

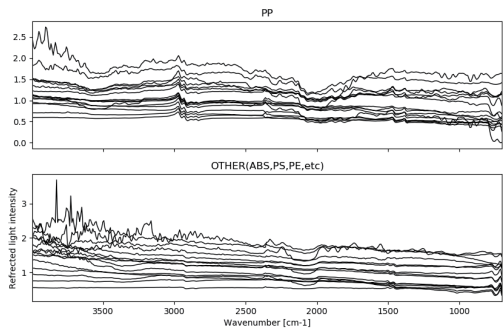


Fig. 4: 試料の反射スペクトル例

3. Method

物質の透過率スペクトルを用いたフィルタのうち最もシンプルなもの、38 種のフィルタ原材料をそのまま単品でフィルタとして用いたものである。すなわち s 次元ベクトルの入力スペクトル I に、 m ($= 38$) 種のフィルタの吸収係数スペクトル F ($m \times s$ 次元) を掛けて m 次元に射影したベクトルを入力とするものである。

AW 法を用いたニューラルネットにおいて正答率 99.7% であるのに対して、この単品をフィルタとして用いる方法では

PES, PET, PC, PCTFE, PPO, PPS, PBT, PMMA

*2 本稿での光学用語:

吸収係数: 単位量 (= 光路長) 当たりの吸光度
吸光度: 光線の透過率を a とした場合、 $-\log(a)$
反射スペクトル: 試料表面で反射して光の光強度ベクトル
透過率スペクトル: 波長毎の透過率を示すベクトル

*3 樹脂種別及び数は ABS : PS : PP : PC : PA : PUR : PMMA : PE : OTHER = 102657 : 66175 : 33664 : 583 : 447 : 239 : 171 : 63 : 80 である。本稿では学習に 9 割、テストに 1 割を割り当てている。学習では PP, 非 PP の比率が等しくなるようにミニバッチを数量の正規化し、テストにおいては数量の正規化を行わず、16.5:83.5 の比率のまま正答率を算出している。

38 個のフィルタを使っても 97.7% と正答率が落ちるため、本手法の難しさが伺い知れる。*4

ここで厚みが異なるフィルタを考える。フィルタの光路厚み a に対して透過率スペクトル T は $\exp(-T * a)$ と指数的に変化する。観測される値 O はスペクトル添字を i として $O = \sum_i I_i * \exp(-T_i * a)$ であり、その後の演算によって光路厚み a の変化を補正するような事は出来ない。すなわちフィルタ材質の選定に加えてフィルタ厚み a の選定も反射スペクトルから観測ベクトルへの射影を変化させる要因である。

以上を踏まえて、 m ($= 38$) 種のフィルタ材料を混合して f 個のフィルタを作成する事を考える (Fig.5)。吸収係数 A と吸収係数 B の物質を分量 a, b で混合した場合の透過率は $\exp(-aA - bB)$ で示される。同様に $f \times m$ 次元の混合行列 X を用いて f 個のフィルタの透過率スペクトルを示す行列 G は $G = \exp(-X F)$ *5 で与えられる。ここで混合行列 X はニューラルネットパラメータとして最適化されるパラメータ変数であり、各要素はそれぞれのフィルタで用いる材料の分量 (= 透過光路長) そのものである。したがって、この混合行列の最適化を含むニューラルネットの最適化結果はすなわち、光学フィルタの材料配分の最適設計値となる。

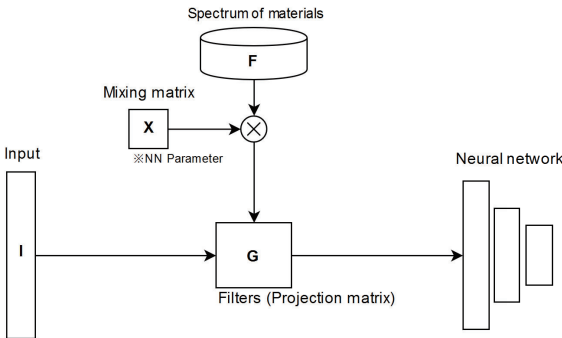


Fig. 5: 混合フィルタを用いた NN

4. Result

装置に搭載するフィルタの数を 5 から 9 として、PP、非 PP を判別する実験を行った (Table.3.)。フィルタ数 7 の時にテスト

Table 1: 各条件での正答率 (%)

	AW	F38	f=5	f=6	f=7	f=8	f=9
Train	99.7	86.7	97.4	98.8	98.6	98.8	99.1
Test	99.7	96.7	88.1	97.7	99.6	98.6	91.0

AW : AW 法による 4 波長を利用した NN
F38 : フィルタ素材 38 種を用いた NN
f=n : フィルタ数を n にした混合フィルタを用いた NN
Train 正答率は PP : OTHER=1 : 1 で評価
Test 正答率は PP : OTHER=16.5 : 83.5 で評価

正答率が 99.6% と最も高くなっている。AW 法による 99.7% に比べ劣るものの僅差であり、フィルタの材料候補を増やせば表現力が向上して、同等の正答率にする事は可能だと考えられる。また本実験では物理的に行うフィルタによる射影をシミュレーションで行っている。そのためにシミュレーション用に用いた吸光係数スペクトルの分解能がフィルタ原材料を測った分

*4 F38 については上界をさぐるため 7000epoch 中の最高値,AW については 800epoch 目の値、その他については 7000epoch 目の値を示している

*5 本稿での $\exp$ は行列/ベクトル要素単位での $\exp$ である。

光装置の性能に制限されている。その点も判別性能に影響を与えてると考えられる。したがってシミュレーションで設計した後に、実機でファインチューニングする事がより望ましいと考えられる。

5. Conclusion and Future work

複数の材料を混合したフィルタを用いて樹脂判別などの判別ができる事、およびその際の混合比をニューラルネットワークを用いて自動で最適化可能であることを示した。この技術を用いれば分光分析装置を用いる場合に比べ性能が僅かに落ちるものの、安価で軽量な分光判別装置が自動で設計できる。

本稿のニューラルネットワークで最適化できるのは、フィルタの透過率スペクトルをシミュレーションした設計となる。そのため分光分析装置の波長分解能を超える急峻な吸光ピークをもつ物質では結果に誤差を含む。今後はファインチューニングとして現物のフィルタを用いる手法を検討したい。

6. Appendix

本実験で用いたネットワークの構成および、実験結果をいかに付録として示す。

6.1 各テスト正答率

各条件での 20epoch ごとの正答率を Fig.6 に示す。AW に関しては早期に正答率が安定したため 800epoch で処理を打ち切っている。

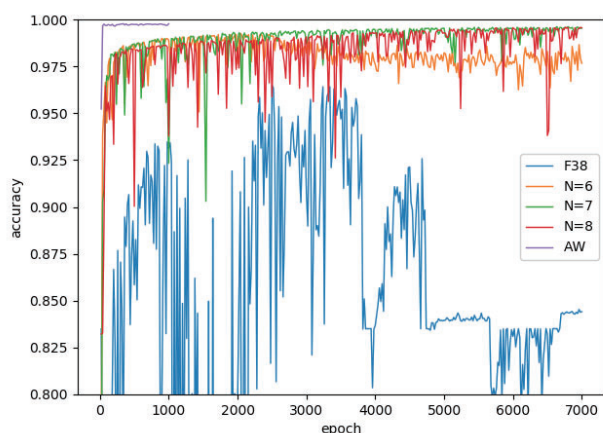


Fig. 6: テストデータでの正答率

6.2 AW 法を用いたニューラルネットワーク構成

入力 428 次元に対して AW 層をはさみ、その後は出力次元数がそれぞれ 100,10,10,2 である全結合ニューラルネットワークとした。Lasso パラメータとして $1e-6$ を設定し、AW の Lasso を $1e-5$ に設定した。また AW 更新率 u は 0.1, 更新周期は 30 イテレーションであり、確率的無効化 (SI) の σ にかけるパラメータは 1 とした。

6.3 単品フィルタを用いたニューラルネットワーク構成

各フィルタを通過した 38 次元の入力を上の AW 法を用いたニューラルネットワークと同様の構成のネットワークに入力した。AW 層は用いていない。なお Lasso のパラメータは $1e-6$ であるが、第一層のみ $1e-5$ にしてある。

6.4 提案手法の構成

混合フィルタの数の次元数を入力次元数とするニューラルネットワークで、その後の出力次元数がそれぞれ 8,8,8,2 である全結合ニューラルネットワークとした。Lasso パラメータは $1e-6$ であるが、フィルタ混合行列 X のみ $1e-4$ である。

6.5 ハイパーパラメータ設定

全結合層出力に対する活性化関数は elu とした。学習は Adam を用いて行っており、学習パラメータは Chainer4.0 のデフォルト値である。バッチサイズは提案手法のみ 1000 であり、その他は 800 である。

参考文献

- [吉井 07] 吉井 光良, 喜多 純一, 岡田 昌之, 望月 崇孝, 木下 太生, 武内 誠治, 赤丸 久光: 飲酒検知装置, JP2008253455A (2007), 出願 2007-097679 (2007/04/03) 公開 2008-253455 (2008/10/23)
- [野田 18] 野田 陽: 補助重み法によるニューラルネットワーク上での特徴選択と過適防止, 人工知能学会全国大会論文集, Vol. 2018, pp. 2J402–2J402 (2018)