

未知の元素が混在するスペクトルのニューラルネットワークによる解析

Analysis of spectra with unknown elements using neural network

日本原子力研究開発機構¹ ○大場正規¹

JAEA¹, °Masaki Oba¹

E-mail: ohba.masaki@jaea.go.jp

LIBSなどで得られた多元素スペクトルデータの解析方法としてニューラルネットワークによる解析システムの構築を行っている。今回は Gd、Ti、Zr の3種の元素をそれぞれ解析するシステムを用いたが、今回は、Zrのスペクトルを未知の元素として Gd 及び Ti の2種類の元素を解析する。すなわち Zrのスペクトルはノイズとみなす。

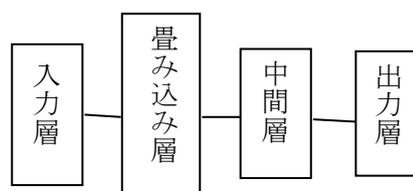
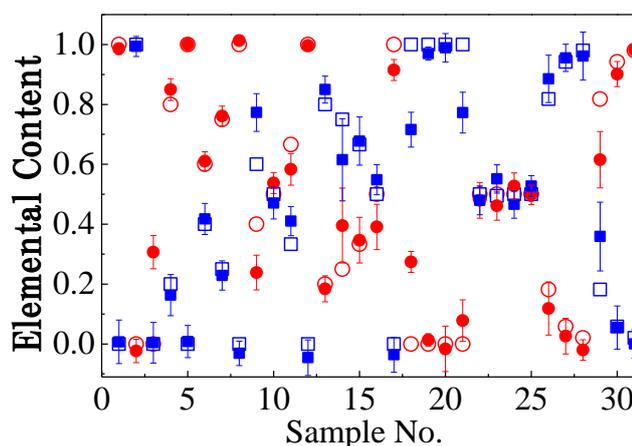


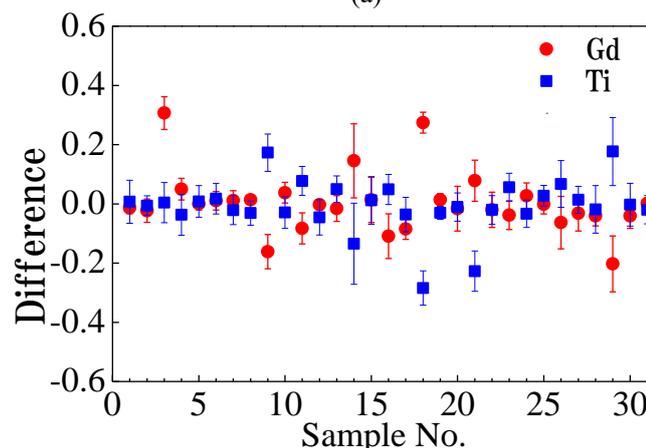
図1 ネットワーク構成

今回用いたニューラルネットワーク

は、入力層-畳み込み層-中間層 (1層) - 出力層という構成である (図1)。畳み込み層は10ノード20パターン用いた。入力層には各ピクセルにおける信号強度を各ノードに inputs、畳み込み層及び中間層での活性化関数はシグモイド関数、出力層の活性化関数は恒等関数で各元素の組成比を正解値データとして線形回帰問題とする。Gd₂O₃、TiO₂、ZrO₂の混合割合をかえて作成した31種類の試料を用い、Zrのスペクトルを未知の元素とするので、GdとTiの和を1 (=100%) として学習データを作成し、それぞれ5回ずつ測定したデータを学習させた後、別に測定して得られたテストデータを用いて各元素の組成比を解析し、各試料について10回の平均値を解析値とした。それぞれの元素比を求める。図2に測定で得られた解析値(a)及び解析値と正解値との差(b)を示す。差は概ね±0.2の範囲であった。未知の元素が混在したスペクトルでも解析は可能と考えられる。



(a)



(b)

図2 解析結果

(a) : 白抜きマークは正解値、塗りつぶしは解析値

(b) : 解析値-正解値