

ニューラルネットワークによるスペクトル解析

Spectral analysis using neural network

日本原子力研究開発機構¹ ○大場正規¹, 宮部昌文¹, 赤岡克昭¹, 若井田育夫¹

JAEA¹, °Masaki Oba¹, Masabumi Miyabe¹, Katsuaki Akaoka¹, Wakaida Ikuo¹

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

LIBSなどで得られたスペクトルデータの解析方法としては、フィッティングなどの理論的な計算による方法が一般的であるが、最近注目されている機械学習による方法も考えられている。本試験では、いくつかの元素が混在したスペクトルのニューラルネットワークによる元素組成解析方法を試みた。

今回用いたニューラルネットワークの構成は、①入力層-畳み込み層-中間層（1層）-出力層と、②入力層-中間層（2層）-出力層とい

う2種類の構成を用いて比較した（図1）。①の畳み込み層は10ノード20パターン用いた。ここではプーリング層は用いていない。また、②の中間層2層は各100ノードである。入力層には各ピクセルにおける信号強度を各ノードに入力、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、出力層の各ノードに各元素を対応させて

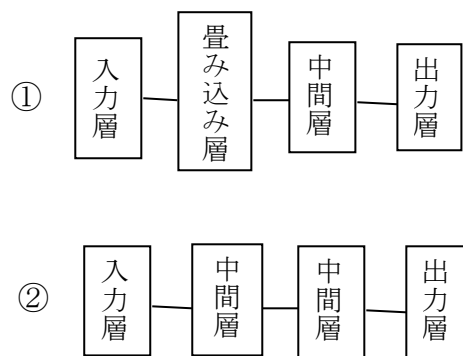


図1 ニューラルネットワークの構成

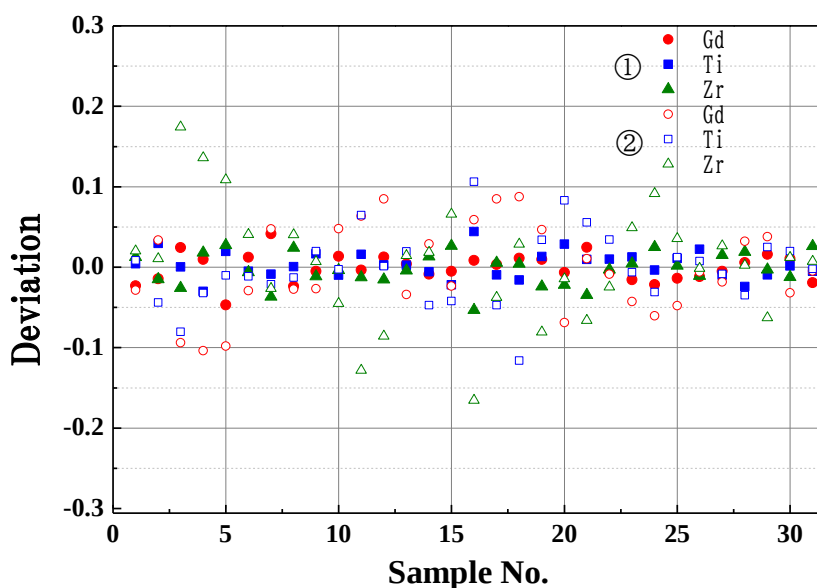


図2 解析結果

分類し、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している。 Gd_2O_3 、 TiO_2 、 ZrO_2 の組成比を変えた31種類の試料を用いて5回ずつ測定した155個のデータを学習データとして①及び②のそれぞれのプログラムで学習させた後、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5回の平均値を解析値とした。100%を1として、図2に測定で得られた解析値と正解値の偏差を示す。①構成の場合、偏差は約0.05、②構成の場合、偏差は約0.1で、下限値もそれぞれ5%及び10%となる。①構成の方が偏差が小さいという結果が得られた。これは、畳み込み層による可能性が考えられる。