

3 種高分子試料 TOF-SIMS データの自己符号化器による解析におけるハイパーパラメータ評価

○伊藤 克¹, 松田和大^{1,2}, 青柳 里果¹,

¹成蹊大学大学院理工学部, ²株式会社東レリサーチセンター

Parameter evaluation of autoencoder for analyzing TOF-SIMS data of three polymers

○Masaru Ito¹, Kazuhiro Matsuda^{1,2} and Satoka Aoyagi^{1*}

¹Seikei University, ²Toray Research Center Inc.

1. はじめに

飛行時間形二次イオン質量分析 (TOF-SIMS) は分子の3次元イメージングや化学構造情報を得ることができる強力な表面分析手法であることから、様々な分野に幅広く利用されている[1]。スペクトルとイメージからなる TOF-SIMS データの解析には多変量解析が用いられてきた[2]が、様々な分子由来のスペクトル情報が重なってデータの解釈が困難な場合も多く、新たな解析手法を組み合わせることでデータを解釈することが非常に重要である。近年では、人工ニューラルネットワーク (ANN) を使用した教師なし学習手法の一つである自己符号化器 (autoencoder) を用いた TOF-SIMS データ解析も報告されている[3-5]。Autoencoder は多変量解析よりも詳細に情報を引き出せると期待される手法[3]であるが、正則化などのハイパーパラメータが多く存在し、TOF-SIMS データにおける最適な学習方法は確立されていない。本研究では、autoencoder を用いて、比較的単純な3種高分子4層試料の TOF-SIMS データ[2]解析を適切に行うことで、autoencoder の基本モデルを示すことを目指す。

2. 実験方法

3 種類の高分子 polyethylene terephthalate (PET), polystyrene (PS), polycarbonate (PC) を4層に重ねた試料の TOF-SIMS データ[2]をモデル試料データとした。自動検索した 1089 個の質量ピークの各ピクセルでの二次イオン強度を 1089×16384 行列データとして数値化した。データ前処理として、各ピクセルでの総二次イオン強度による規格化の後、min-max scaling, auto scaling で規格化したものを用意した。TOF-SIMS デー

タは、Deep Learning Toolbox, (MATLAB, Mathworks Inc.) の自己符号化器 sparse autoencoder で解析した。MATLAB の sparse autoencoder には、デフォルト設定で KL divergence を用いたスパース正則化と L2 正則化が含まれている。

3. 結果と考察

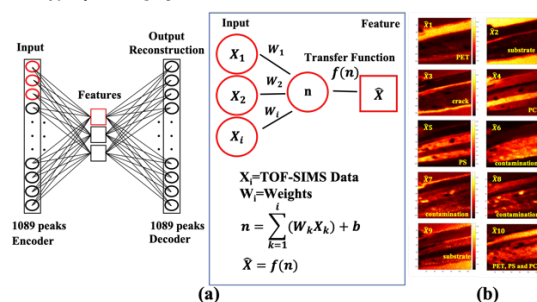


Fig.1. (a) Schematic model of autoencoder, (b) The features extracted by autoencoder

Fig. 1 に autoencoder の概略図と、autoencoder で分類された高分子試料の特徴の例を示す。主成分分析や多変量スペクトル分解などの多変量解析[2]と同等の情報だけではなく、条件設定によっては、多変量解析では抽出されなかった情報も抽出した。

文 献

- 1) I. S. Gilmore, J. Vac. Sci. Technol. A 31, 050819 (2013)
- 2) Y. Yokoyama et al., Surf. Interface Anal., 47(4) 439-446 (2015)
- 3) K. Matsuda, S. Aoyagi. Biointerphases 15, 021013 (2020)
- 4) T. Kawashima, T. Aoki, Y. Taniike, and S. Aoyagi, Biointerphases 15, 031013 (2020).
- 5) T. Akiyama, N. Miyauchi, A. N. Itakura, T. Yamagishi, and S. Aoyagi, J. Vac. Sci. Technol. B, 38, 034007 (2020)

*E-mail: aoyagi@st.seikei.ac.jp