

マイクロプラスチックのFT-IRスペクトルに対するU-Netを用いた特徴抽出の試み

愛知県環境調査センター ○成瀬憲政 木村由紀子 市川智宏

1 背景・目的

- マイクロプラスチック(MP)の同定においてFT-IRは有効な技術の一つである
- ただしMPは微細であることからノイズの多いFT-IRスペクトルとなることが時折ある
- ノイズが多いスペクトルはライブラリ検索のスコアが低くなるため判別が難しくなる

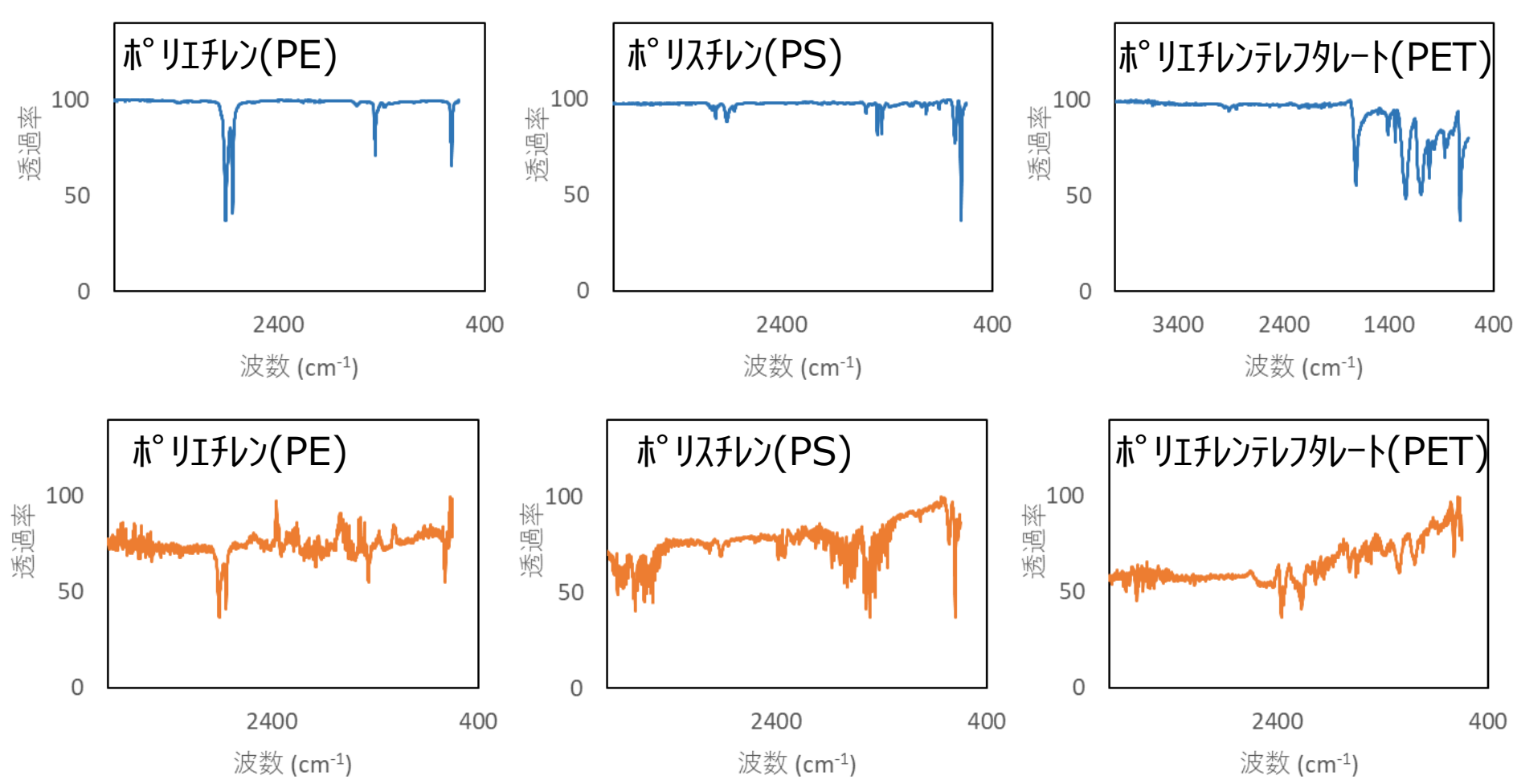


図 マイクロプラスチックのIRスペクトル
上段：良好なもの 下段：ノイズが多いもの

ノイズが多いスペクトルも
容易に判別できる方法を目指す

2 方法

- ディープラーニングモデルの一つであるU-Netを利用
- U-Netは医療画像解析において提唱されたモデルであり画像のセグメンテーション(領域抽出)を行うことができる
- 引用文献¹⁾によるとU-Netは2次元データである画像を入力及び出力するがモデルを調整することで1次元データであるスペクトルについても適用可能

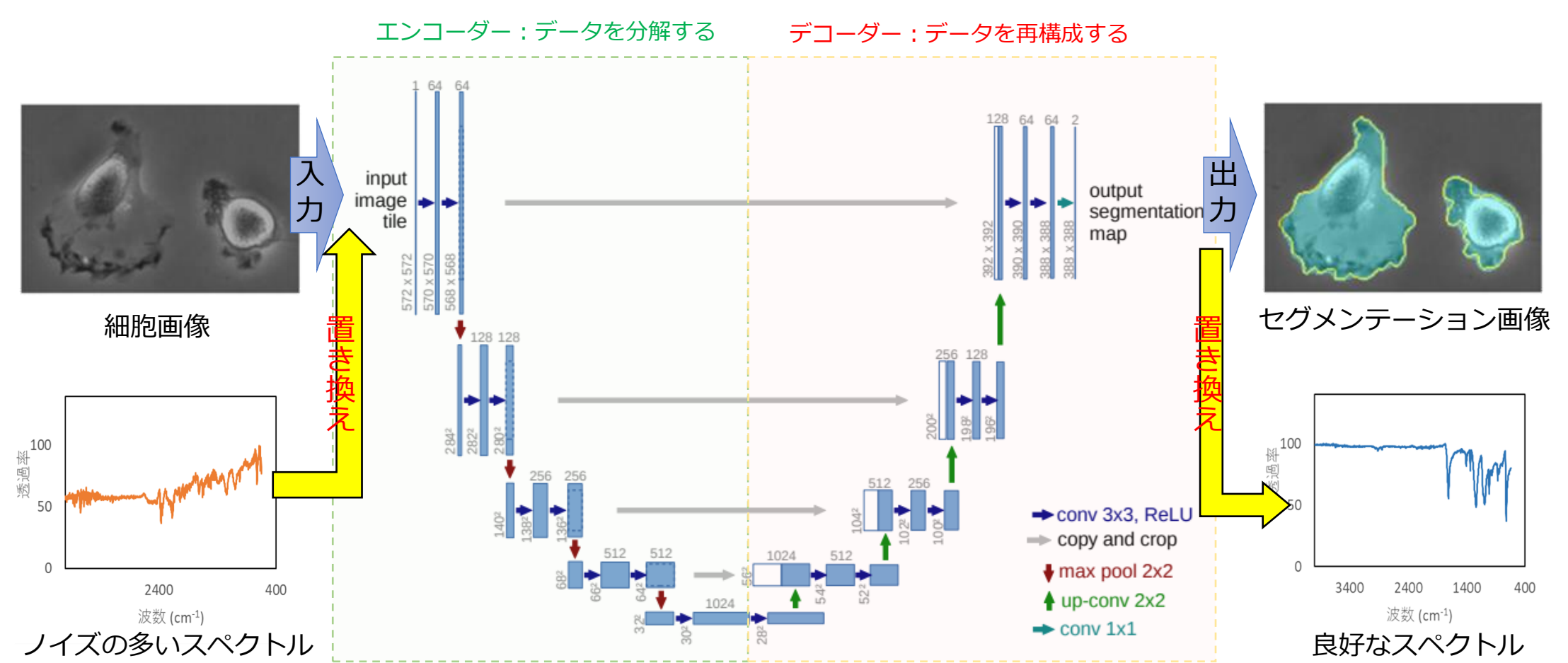


図 U-Netのモデル構造及び細胞画像のセグメンテーション
(引用文献¹⁾より一部改変)

U-Netモデルを用いてノイズが多いスペクトルから
判別を容易に行うことができるスペクトルを生成する

3 結果

U-Netモデルの作成

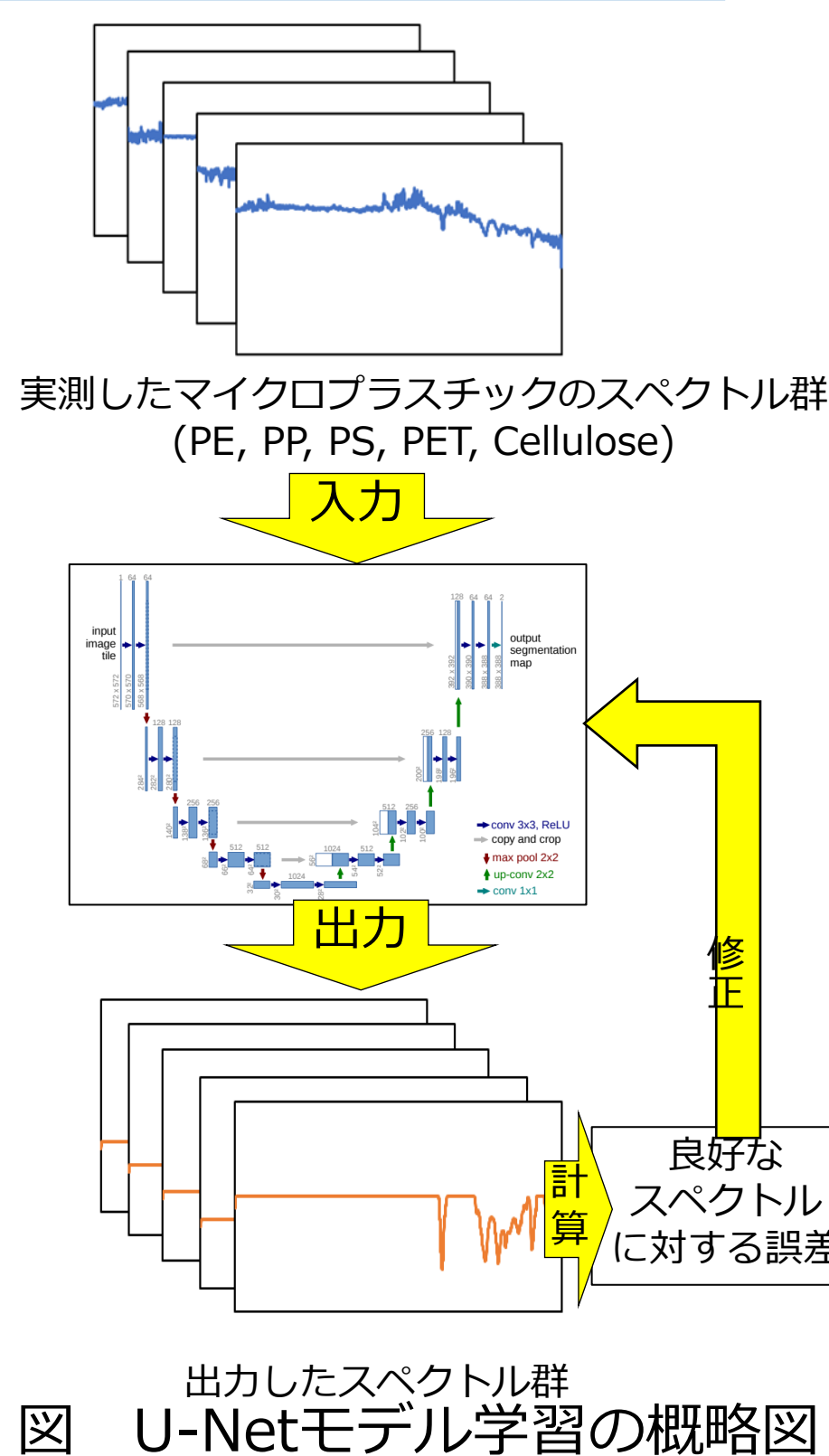


図 U-Netモデル学習の概略図

スペクトルの生成

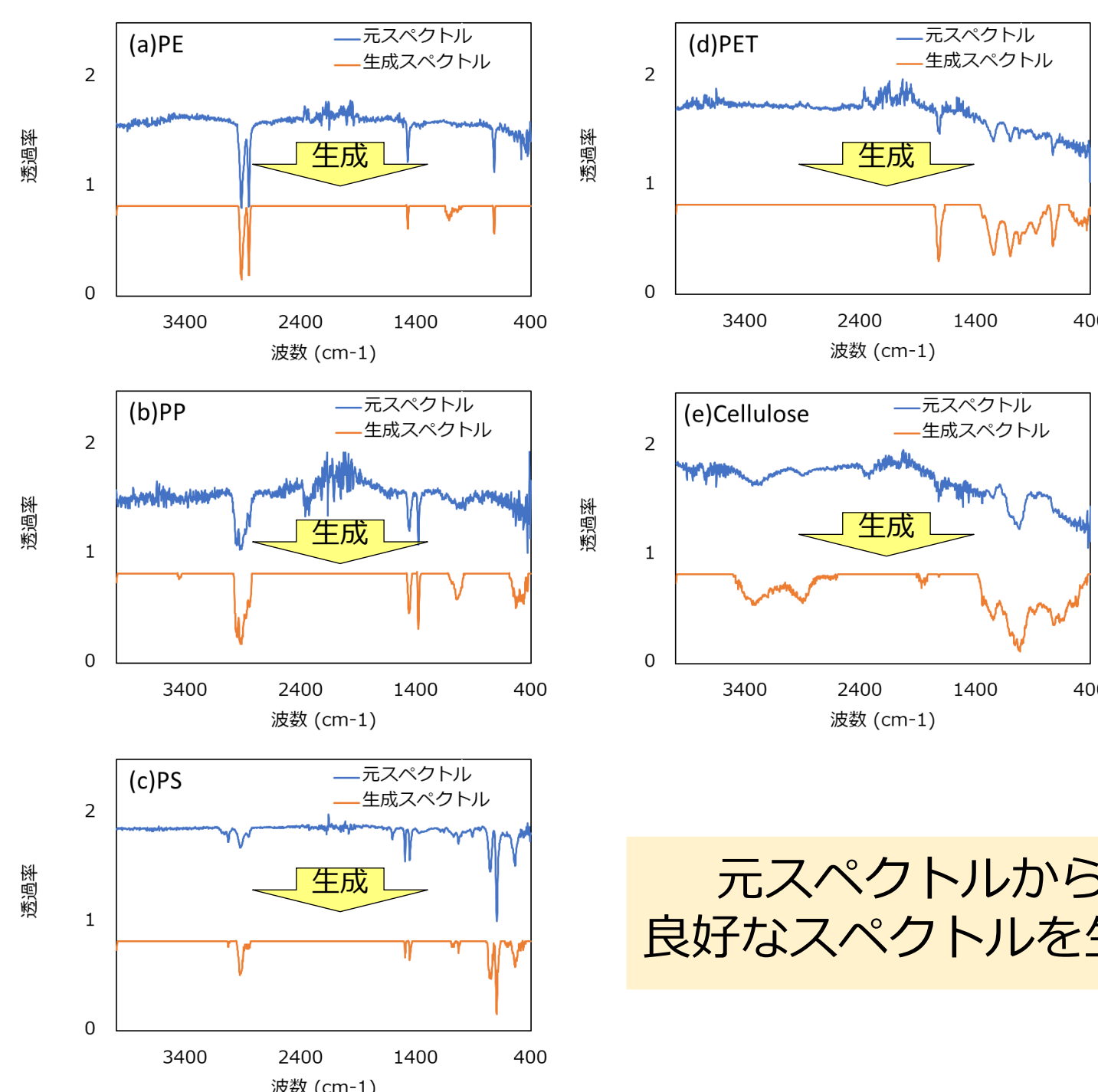


図 U-Netにて出力したスペクトル

元スペクトルから
良好なスペクトルを生成

生成スペクトルの評価

t分布型確率的近傍埋め込み法(t-SNE)
にてスペクトルの類似性を可視化

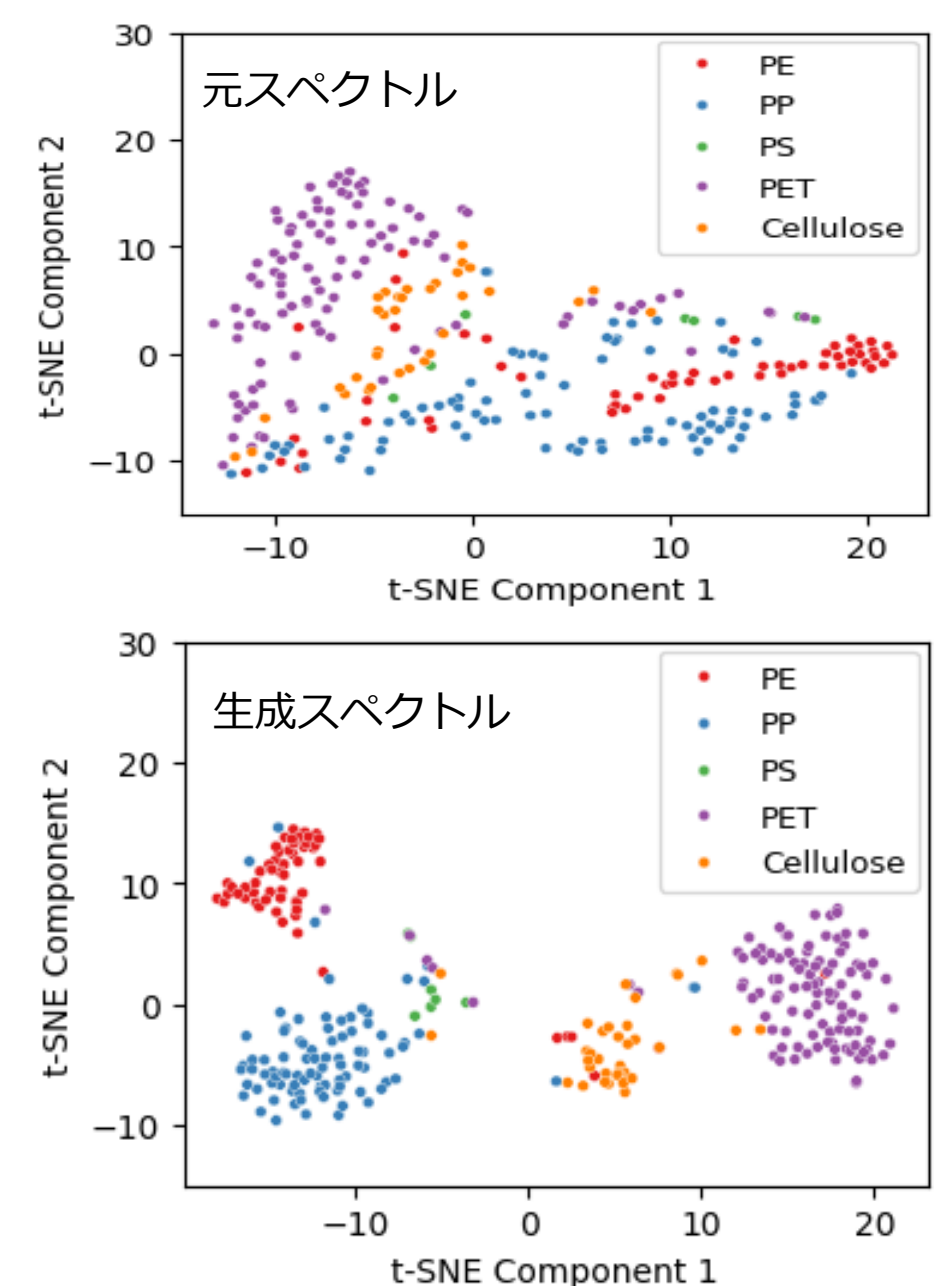


図 スペクトルのt-SNEによる次元圧縮

4 まとめ・今後の課題

- FT-IRスペクトルを用いて学習したU-Netにより試料の化学構造に由来するスペクトルを生成できることを確認した
- 実測したスペクトルだけでなく標準試料から得られたスペクトルを用いたモデルの作成と評価が今後の課題

【引用文献】

1)Ronneberger, Olaf, Philipp Fischer, and Thomas Brox.(2015). "U-net: Convolutional networks for biomedical image segmentation." *Medical image computing and computer-assisted intervention—MICCAI 2015: 18th international conference, Munich, Germany, October 5-9, 2015, proceedings, part III* 18. Springer International Publishing, 234-241.