

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

○成瀬憲政

1 はじめに

マイクロプラスチックの同定においては FT-IR の全反射吸収法（ATR 法）が広く用いられている。しかしながら、マイクロプラスチックは試料が微小であることに加え、環境中で酸化等による劣化が IR スペクトルに影響するため、必ずしも良好なスペクトルが得られると限らない。そのようなスペクトルではライブラリ検索においてスコアが低くなり、同定が困難となる。そこで本報では、その対策としてディープラーニングモデルの一つである U-Net を活用してノイズが多いスペクトルから、試料の化学構造に由来するスペクトルを生成することを試みたので報告する。

2 U-Net モデル

本報で構築した U-Net のモデル構造を図 1 に示す。モデルの前半部はエンコーダと呼ばれ、入力データの畳み込み計算とプーリングによる圧縮を繰り返しながらチャンネル数を増やすとともにスペクトルのサイズを小さくしていく。後半部はデコーダと呼ばれ、エンコーダで圧縮したデータを拡張畳み込みと呼ばれる処理でサイズを大きくしていき、入力データと同じサイズ of 出力データを得る。また、U-Net の特徴として、エンコーダの途中で出力されたデータをデコーダの途中の層に直接送るスキップ接続と呼ばれる処理を行っている。本報では入力データに 400 cm^{-1} ～ 4000 cm^{-1} の波数からなるスペクトルデータを用いており、出力もまた同じ波数のスペクトルデータを得るようモデルを設計した。

このモデルの学習及び評価には 2023 年 7 月及び 12 月に逢妻川、新川、矢作川、豊

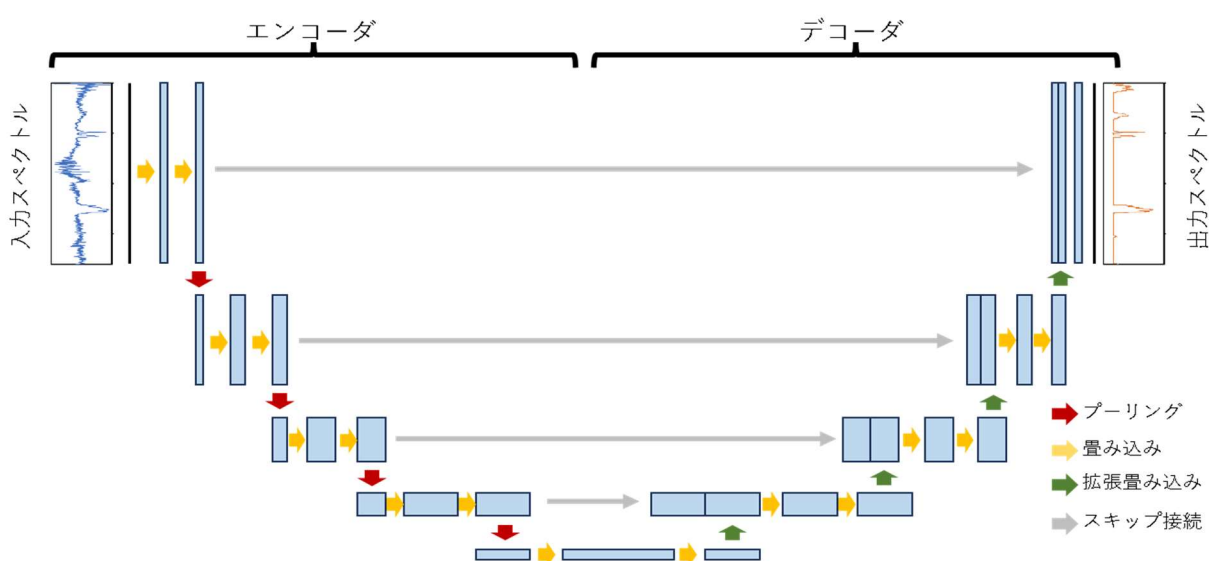


図 1 U-Net モデルのネットワーク構造

川にて採取した試料のうち、ポリエチレン(PE)、ポリプロピレン(PP)、ポリスチレン(PS)、ポリエチレンテレフタレート(PET)及びセルロース(Cellulose)として判別したスペクトルを用いた。ノイズや妨害ピークの少ないスペクトルを正解スペクトルとして定義し、U-Net に入力したスペクトルが正解スペクトルに近づくようにモデルの学習を行った。

3 結果

学習済みのモデルにてスペクトルの生成を行った例を図2に示す。なお、スペクトルの可視性を高めるために元スペクトルをシフトさせている。

PEでは CH_2 の伸縮振動(2914 cm^{-1} 、 2854 cm^{-1})及び変角振動(1466 cm^{-1} 、 720 cm^{-1})、PPでは CH_2 及び CH_3 の伸縮振動(2950 cm^{-1} 、 2914 cm^{-1} 、 2870 cm^{-1} 、 2854 cm^{-1})及び変角振動(1458 cm^{-1} 、 1376 cm^{-1})等、いずれの試料についても化学構造に応じた特徴的なピークを有するスペクトルが得られている。ただし、一方でPEやPPでは 1000 cm^{-1} から 1100 cm^{-1} において、その化学構造由来とは考えられないピークが生成されている。これは、正解スペクトルにはプラスチックだけではなく微小な異物等のピークも含まれており、スペクトルを生成する過程で、そのピークもまた生成されたと考えられる。この対策としては、実際の環境から得られたマイクロプラスチックのスペクトルではなく、フィルムなど基準試料から得られたスペクトルを正解スペクトルとして用いることが考えられる。

今後の方針としては、基準試料のスペクトルをモデル作成に織り込む他、単一のプラスチックだけではなく複数のプラスチックが混在した試料についても、スペクトルを生成できるようにする等の改善を試みたい。

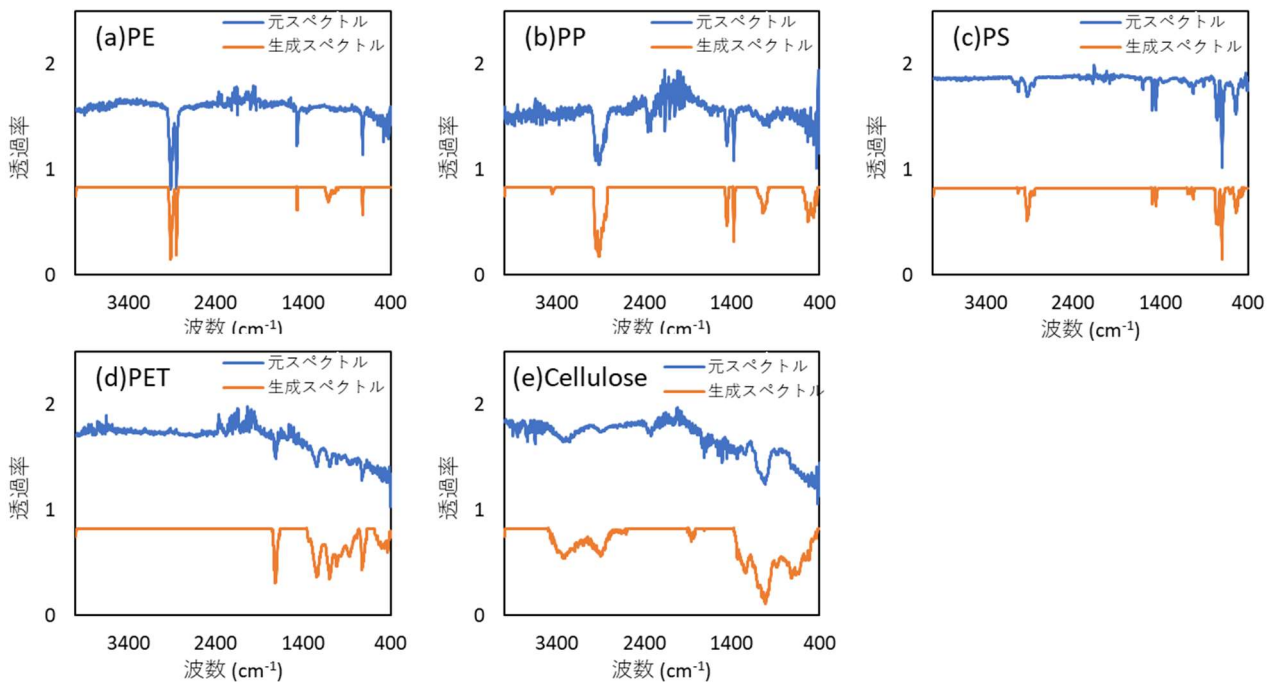


図2 元スペクトルと生成スペクトルの比較