

別紙 4

報告番号	※	第	号
------	---	---	---

主 論 文 の 要 旨

論文題目 深層学習による分光反射スペクトルからの変質鉱物同定
(Identification of Alteration Minerals from Reflectance Spectra Using a Deep Learning Method)

氏 名 田中 壮一郎

論 文 内 容 の 要 旨

本研究は、深層学習を用いて分光反射スペクトルデータから変質鉱物同定を自動的に行う方法の開発と、その有効性の検討を目的としている。黄銅鉱などの鉱石鉱物そのものは変質鉱物より広がり狭く、地表に露頭が出ていない限り鉱床探査を行う上で直接的な探査指標にはならないため、一般に広がり示す変質鉱物を探査指標として追跡する。このため、変質鉱物同定は金属鉱床探査において非常に有用である。鉱床形成時、鉱床周辺の変質帯には特定の変質鉱物が広く分布し、時には同心円状を示し、中心から酸性変質帯、中性変質帯、アルカリ性変質帯などの変質ハローを示す。これらの変質鉱物は、短波長赤外域に特徴的な吸収ピークを持ち、金属鉱床探査において重要な指標となる。

変質鉱物の吸収ピークは鉱物特有の波長位置に認められ、時には吸収ピークの位置が数 nm の違いで他の変質鉱物と区別される。しかし、近年普及が進んでいる安価な分光器では、波長校正後も波長方向の誤差が数 nm 程度ある場合が認められ、誤同定の要因になっている。また、目視で変質鉱物を同定する際には、どの波長域の吸収スペクトルのどのような性状に注目すべきかを、鉱物の反射スペクトルに関する専門知識を持った人間が判断しなくてはならない。

深層学習は人間の脳神経回路をモデルにした多層構造アルゴリズムで、自ら学習しデータに潜む特徴量を抽出する。この深層学習を用いることで、波長方向の誤差の問題及び吸収スペクトルのどこに注目して特徴を取り出すかは、深層学習に任せることができる。

本研究では、熱水性鉱床探査の指標となる変質鉱物など 24 種類を同定対象とし、各変質鉱物を 30 回測定した後、これらのデータに対して 50 倍のデータ拡張（オーギュメンテーシ

ョン)を実施した。また分光反射スペクトルデータをそのまま用いる場合と、分光反射スペクトルデータに包絡線(以下、HQ: Hull quotient)処理を適用したものをを用いる場合の二つのケースを検討した。データ数は1セット36,000個で二つのケースで総計72,000個である。深層学習の多層構造アルゴリズムとしては、多層パーセプトロン(以下、MLP: Multi-Layer Perceptron)と畳み込みニューラルネットワーク(以下、CNN: Convolutional Neural Network)の二種類のネットワーク手法を鉱物同定に適用した。ネットワークの検証には交差検証法を用いた。データを5分割して4分割分を学習データとして用い、残りの1分割分を検証用のテストデータとした。検証は5回行い、適合率(precision)と再現率(recall)の調和平均であるf値及び正答率の平均値で評価した。

MLPは順伝播型の代表的なニューラルネットワークで、誤差逆伝播法を適用した非線形教師あり学習手法で、1次元のデータも取り扱える。全結合層とドロップアウト層の単純な層構造の繰り返しで構成されているため、学習時間は比較的短い、パラメータ数が多く調整が難しい。MLPは、一般には過学習を起こしやすくノイズに弱く、収束が遅いとされている。MLPの検討において、HQ処理を施していないデータを学習データとし、Small層、Medium層、Large層の層構造の異なる3タイプについて変質鉱物の同定処理を行った。交差検証を行ったf値は、Small層、Medium層、Large層に対して96.1%、96.4%、96.2%の値をそれぞれ示した。さらにHQ処理を施したSmall層、Medium層、Large層に対して交差検証を行った結果、f値は97.5%、96.8%、97.1%の値をそれぞれ示した。このようにHQ処理を実施することで、0.4~1.4%のf値の上昇が確認された。またHQ処理を施したネットワークには、過学習を起こさずモデル化が可能であるものがあり、HQ処理が過学習抑制に貢献していることが明らかになった。各f値に大きな違いはないが、正答率・損失関数とエポック数のグラフからは、HQ処理を行った4層のSmall層(全結合層4層、ドロップアウト層3層)が過学習を起こさずに安定していた。さらに層構造を薄い構造にして、どの程度の構造が最適か確認したところ、Small層よりも薄い構造のHQ処理を行った3層のMLPが変質鉱物自動同定のためのモデル化に最適であることが判明した。

CNNは近年、画像識別競技会などで良好な成績を示しており、畳み込み層やプーリング層などの新しいテクニックを使えることが有利な点である。1次元CNNは時系列の連続データにも用いられており、分光反射率は連続する1次元データ群であるため、適用を試みた。2次元CNNは形態等を学習することができ、人間が反射率パターンから鉱物を同定するときの思考に類似した解析法と考えられている。CNNは、一般に過学習が起きにくいと考えられている。HQ処理を施していない画像解像度を落としたテストデータに対して、2次元CNNは96.7%というf値を示した。一方、1次元CNNではf値が89.8%であった。これは

1次元 CNN の特徴から、分光反射スペクトルの形態や特徴量を精度よく抽出できていない可能性があることを示している。MLP と同様、HQ 処理を実施することで、f 値の上昇が確認された。1次元 CNN は 92.3% の f 値を示し、2次元 CNN で 97.4% の f 値を示した。しかし、いずれの CNN も、過学習が起き、またエポック後半で損失関数の動きに乱れがあり変質鉍物自動同定のためのモデル化は困難であった。

深層学習による分光反射スペクトルからの変質鉍物の同定を行った結果、いくつかの MLP で高い f 値(例えば MLP_S_HQ の 97.5%)を示した。これは学習を進めていくなかで、深層学習が自ら分光反射スペクトルに潜む識別概念を作成し、特徴を抽出できたことに他ならない。このことは深層学習が変質鉍物同定に有効であることを示している。

本研究では、MLP の層数と同定能力の関係については、MLP の層数が多くなるに従い過学習の傾向を示した。HQ 処理により、正答率・f 値が上昇し、MLP では MLP_S_HQ よりもドロップアウト層が一層少ない 3 層の MLP、MLP_S_HQ、および MLP_M_HQ で学習モデルが生成できた。また、MLP の同定鉍物数と測定回数との関係は、同定鉍物数が少ないほど正答率は上がり、また測定回数が多いほど正答率は上がった。

変質鉍物同定に深層学習手法を適用して、その評価を行う際に問題となるのが、各種のパラメータであり、データ拡張処理を行うときの乱数の与え方も重要である。どの程度の乱数を発生させるかによって、深層学習の結果に大きな影響を及ぼす。今後は変質鉍物の混合比などの連続値を予想する回帰問題でも、深層学習の有効性を確認したい。

作成された学習済みモデルは、市販の携帯型分光放射計による変質鉍物同定システムに深層学習プログラムとして組み込むことが可能であり、コンピュータに実装することにより、現実的な変質鉍物同定システムが製作できると考えられる。