

話題

CoNi ラウンド・ロビンスペクトルの自己組織化マップ (SOM) 法による解析

—装置の特徴が見えてきた?—

徳高平蔵、藤村喜久郎、*吉原一紘

鳥取大学工学部電気電子工学科 〒680-8552 鳥取市湖山町南4-101

*金属材料技術研究所 〒305-0047 つくば市千現1-2-1

tokutaka@ele.tottori-u.ac.jp

今までに話題提供及びJSAの解説ではコホネンのSOM法[1]を紹介した[2]。つまり、スペクトルの学習はうまく行き、また組成の同定にも成功した[3]。ここでは、同一のサンプルを使っての色々な研究所で得られたCoNi合金のスペクトル、いわゆるラウンド・ロビンのデータを使用してこれまでに展開してきた議論及び実験が成り立つかどうかを調べた。その結果は組成の同定は勿論、どうやら測定機種の違いも出来ているようである。

Applications of Self-Organizing Maps (SOM) to the Round-Robin CoNi alloy Spectra Data -By that, is it possible to see the characteristics of the measurement instruments?

Heizo Tokutaka, Kikuo Fujimura and *Kazuhiro Yoshihara

Department of Electrical and Electronic Engineering, Faculty of Engineering, Tottori University, Koyama-Minami, 4-101, Tottori 680-8552, Japan

*National Research Institute for Metals, 1-2-1, Sengen, Tsukuba, 305-0047 Japan
tokutaka@ele.tottori-u.ac.jp

Self-Organizing Maps (SOM) method which was developed by Kohonen[1] was introduced in this meeting[2,3]. Here, the SOM was applied to the Round Robin CoNi spectra data. The results were quite successful, where we can determine the composition from the spectra which were not used for constructing SOM. And also, using SOM, it seems to be possible to classify the instruments where their data were used for SOM.

1 はじめに

今までに話題提供及びJSAの解説ではコホネンのSOM法[1]を紹介した[2]。そしてそこで述べてきたようにスペクトルの学習がうまく行き、また組成の同定にも成功した[3]。そこで、ここでは、同一のサンプルを使っての色々な研究所で得られたCoNi合金のスペクトル、いわゆるラウンド・ロビンのデータを使用してこれまでに展開してきた議論及び実験が成り立つかどうかを調べた。その結果は組成の同定は勿論、どうやら測定機種の違いも出来ているようである。

2 大量データによるSOMの作成と未知組成の同定

同一のサンプルを使ってのA, B, C, ... 研究所のスペクトルの生のスペクトル・データは見た目には非常に違って見える。そこで、バックグラウンドを差し引き、信号の最大値、最小値を用いて規格化した結果、ほぼ

似通ったスペクトルを示すようになった。

さて、1研究所当たり6個の合金のデータを出し15研究所からのデータ合計90個でSOMマップを作成した。SOM学習も近傍関数を普通使われている階段状に取ったSOM.PAKの仕様でbubbleを用いた場合と近傍関数がガウス型関数であるgaussianの二つの場合で行った。ここにbubbleの結果を図1に示す。この場合、マップのサイズは40×50で近傍半径の初期値は25であり、学習回数は20,000回であった。次に、この学習に用いなかったZ研究所の例えばNi25%のデータをテストすると一番良くあったユニットが示すマップ上のユニットは黒く大きい塗りつぶした丸で示すがN研究所のNi25%のユニットに非常に近いことが分かる。そして、スペクトルと元のデータスペクトルを比較したが、完全に枠外の研究所のデータにも拘わらずスペクトルの学習とテストがうまく行われている。つまり、SOMユニットが示すスペクトルとZ研究所のスペクトルデー

タは良く一致した。おまけに、その最整合のユニットが示す組成は $Ni26.02\%$ とほぼ 1% 程度の誤差で合っている。非常に成功した組成、スペクトル同定、すなわち、データ発掘の方法であると考え。このマップの組成の度数分布を調べたが、教師データである 6 個の組成、つまり、 $Ni0, 25, 50, 55, 75, 100\%$ の組成が当然に多いが、この度数分布は全ての組成をカバーしていた。つまり、いかなる組成のスペクトルがテストされても答えを出すものと確信出来る。同じ SOM 学習を今度は、近傍関数にガウス型関数を用いて行った。この場合も、マップのサイズは 40×50 で近傍半径の初期値は 20 であり、学習回数は 20,000 回であった。この場合にも $Ni25\%$ のデータをテストした。今度は、N 研究所の $Ni25\%$ のユニットに前よりさらに近い結果を得た。そして、スペクトルと元のデータスペクトルを比較したが、やはり、スペクトルの学習とテストはうまく行われた。そして、その最整合のユニットが示す組成は $Ni25.19\%$ とほぼ一致した。また、このマップの組成の度数分布は、前の bubble の場合と違って非常に均一に度数が分布しており、学習はよりうまくいったと考えられる。

3 SOM を用いたラウンド・ロビン・データの測定装置の特徴抽出

図 1 をじっくりと良く見ているとどちらもグレー表示をしているので各組成毎に縦に濃いグレーの領域が走っており、組成毎に距離があることが分かる。ただ、 50% と 55% との間には組成が近いこともありあまりはっきりとした境界は認められない。次に、組成毎の境界の中を良く見ると、どうも上段、中段、下段と特定の装置毎に境界があるように見受けられる。そこで、図 1 のグレーマップを以上に述べた意図で分類した結果を図 2 に示す。どの組成でもデータを提出した研究室は 3 グループに分類されていることが分かる。ただ、残念なことに、ラウンド・ロビン・データを無作為に整理する必要もあってほとんどの測定装置名は伏せられており、現時点では追跡不能で分からない。ただ一部のメーカーの機種だけが名前が出ており、それも殆ど第 1 グループに属している。ただ、I 実験室の結果だけが同じメーカーでありながら第 3 グループに分類されている。まず、第 1 グループで同じメーカーだが機種の違う H と S 実験室の結果を較べて見た。S 実験室の結果に少しノイズがあることを除いて結果は殆ど一致している。次に気になる同じ機種であるのに第 1 と第 3 の別々のグループに分かれている H と I 実験室の例を見てみよう。

興味深いことに I 実験室のデータは少しノイズがあるがスペクトルの形は殆ど一致していた。ただ、I 実験室のスペクトルは高エネルギー側に数 eV シフトしていた。このシフトで別グループになったのである。実際、I 実験室の元データを数 eV 低エネルギー側にシフトしてエネルギー軸を合わせ、その後、SOM 形成をさせると第 1 グループに戻った。最後に、第 1 と第 3 で違うグループでまた違う機種の D と H の実験室の場合を比較した。この場合は、スペクトルの形も少し違うし、測定エネルギーも D 実験室のデータが少しだけ高エネルギー側にシフトしているのが分かる。話題提供では以上の結果を詳しく報告させて頂く。

さて、AES の実験で Au と Cu の純金属のラウンド・ロビンのデータを整理した論文 [4] からの引用図を以下の図 3 に示す。この実験の場合、スペクトルは $N(E)$ カーブでは無く、 $dN(E)/dE$ の微分カーブである。それを、図に示すように Au と Cu の色々の AES 信号のピーク・ピーク値の比を整理して示してある。測定装置により二つのグループにはっきり分かれているのが分かる。この図を見てここまで整理をするのは大変だなあと言うのはすぐに分かる。一方、我々の方法は、データを投げ入れて SOM マップを作成するだけで全てが終わる。ただ、組成の境界は、グレー・マップからはっきりと分かるが、機種の違いは同じ組成の領域内では中々分からず全ての組成での機種の違いを見比べて図 2 には人為的に境界を引いた。なお、この人為的に引いた境界によるグループ分けがどの程度意味があるかの検証にはより定量的に調べるネットワークの利用または構築が必要である。

参考文献

- [1] T. Kohonen, "Self-Organizing Maps" (Springer Series in Information Sciences, Volume 30, 1995).
T. コホネン, "自己組織化マップ" 徳高平蔵, 岸田 悟, 藤村喜久郎 訳 (シュプリンガー・フェアラーク東京, 1996).
- [2] 徳高平蔵, "自己組織化マップ (SOM) の化学分析データへの応用と SOM の周辺" Journal of Surface Analysis 3, (1997) 545-557.
- [3] 徳高平蔵, "自己組織化マップ (SOM) による合金組成の決定とスペクトル同定" Journal of Surface Analysis 3, (1997) 684-684.
- [4] 大村卓一 他多数, "VAMAS-SCA-WG in Japan 活動報告" 真空 31, (1988) 744-754.

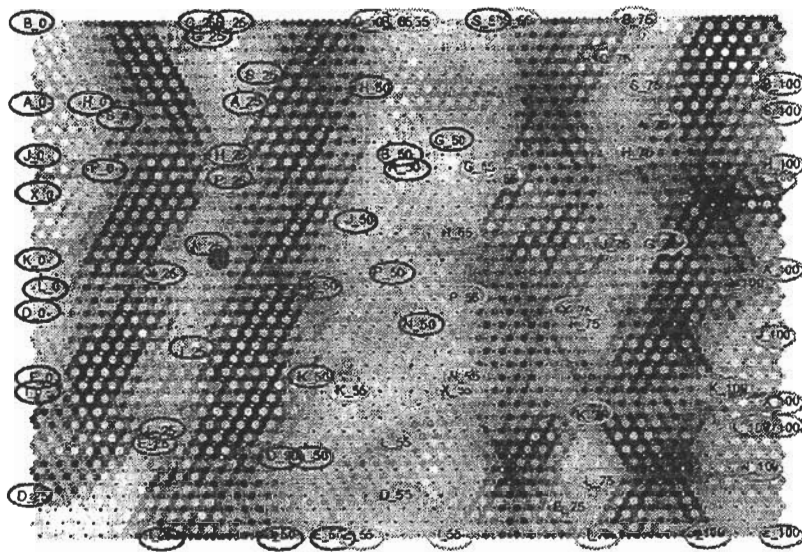


図1 15 研究所からの6 種類のCoNi 合金 (Ni 0,25,50,55,75,100 %) の合計 90 個のラウンド・ロビンデータを利用したSOM。近傍関数は (bubble)、マップのサイズは 40 × 50、学習回数は 20,000 回であった。学習に用いなかったZ 研究所の Ni25% のデータをテストした。一番良く合ったユニットをマップ上に黒く大きい塗りつぶした丸で示す。N 研究所の Ni25% のユニットに非常に近いことが分かる

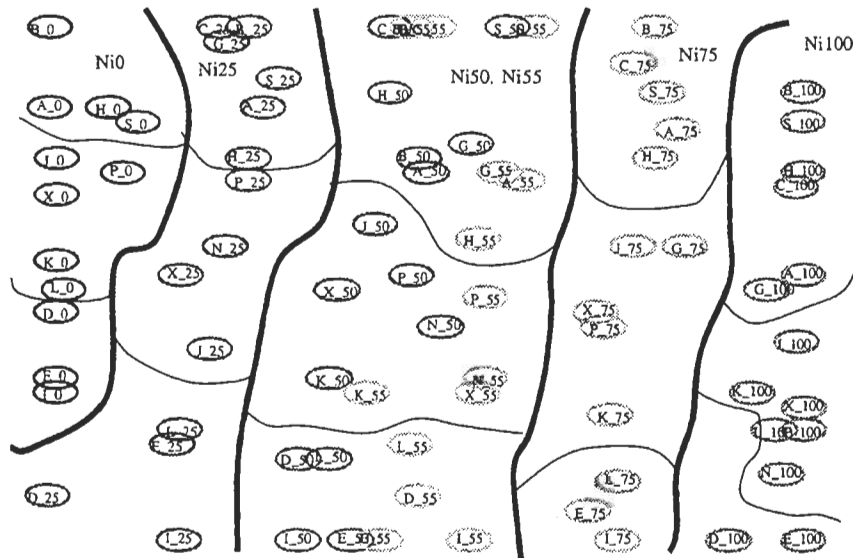


図2 図1 のグレーマップを注意深く観察して意図的に分類した結果を示す。縦の濃い実線で組成を分類し、横の細い実線では実験で使われた装置の種類を3 グループに分類出来ているようである (近傍関数は bubble)。ただ、Ni50% と Ni55% は組成が近いため、その境界は、はっきりしない

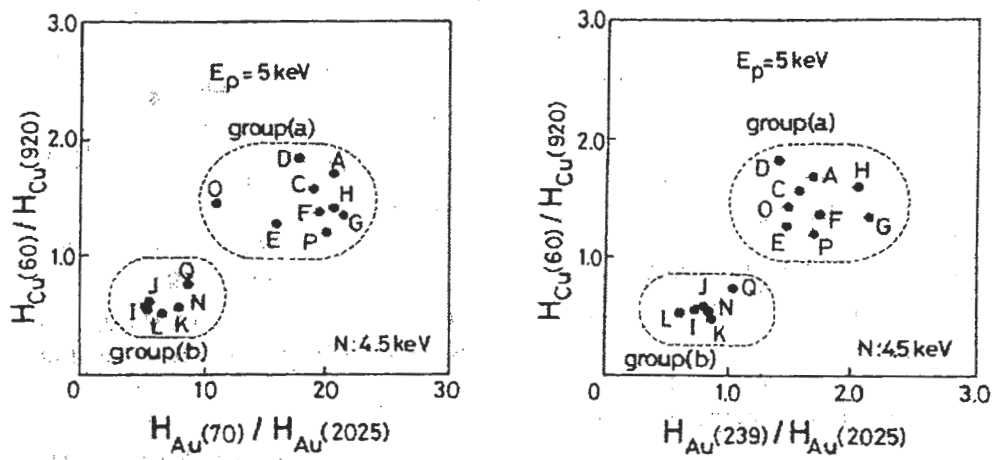


図3 AESの実験でAuとCuの純金属のラウンド・ロビンのデータを整理した論文[4]からの引用図を示す。この場合、スペクトルは $N(E)$ カーブではなく、 $dN(E)/dE$ の微分カーブである。それを、AuとCuの色々なAES信号のピーク・ピーク値の比で整理した。測定装置によりこの場合二つのグループにはっきり分かれているようだ