

## 解説

# インターネット利用の化学スペクトル解析システム

藤村喜久郎, 徳高平蔵  
鳥取大学 工学部 電気電子工学科  
〒680-8552 鳥取市湖山町南4丁目101番地  
E-mail: fujimura@ele.tottori-u.ac.jp  
(2000年5月23日受理)

自己組織化マップ (SOM: Self-Organizing Maps) を用いて化学の分野でよく用いられるスペクトルの解析をインターネットを介しておこなうシステムの試験的な構築をおこなった。本システムはクライアント-サーバーモデルで実行される。クライアントから送られたデータをサーバー側で解析し、クライアントに結果を返すことができる。ユーザー・インターフェースに WWW を用いることで、誰にでも使いやすいシステムを実現した。

## Chemical Spectra Analysis via Internet

Kikuo FUJIMURA and Heizo TOKUTAKA

Department of Electrical and Electronic Engineering, Tottori University  
4-101, Koyama, Tottori, 680-8552 JAPAN

We attempted to create a system to analyse chemical spectra using Self-Organizing Map (SOM) via Internet. This system is performed using the client-server model. The client's data is analyzed on the server (via Internet) and the results returned to the client. We have realized that the system is easy to handle, since WWW is used for user-interface.

## 1 はじめに

SOM法 [1] は、多次元データを2次元平面に自動的に写像することにより今まで見えなかった情報を可視化できるところに特徴がある。最近、自己組織化マップ (SOM: Self-Organizing Maps) を、化学分析スペクトルの解析分野へ応用することにより、この SOM 法が非常に有効な手段であることが分かってきた。特に、我々は、未知合金組成の同定に、この SOM 法を使用して有効な結果を得ている [2]。本研究では、この解析法を WWW 経由で自動的に実行するシステムの構築を試みる。

## 2 SOM による未知合金組成の同定

従来、化学スペクトル分析では、スペクトルに含まれているピークのエネルギー位置、高さや半値幅、ピークの数などを決定して、それらを分析手段として利用していた。ここでは、SOM 法を利

用する。この場合、サンプルデータとしていくつかのスペクトルそのものを利用する。バックグラウンドは引いても良いし、引かなくても良い。ただ、SOM に使用するスペクトル間では、スタートとエンドのエネルギーを合わせる必要がある。また、エネルギー測定間隔も同じに合わせる。勿論、縦軸も規格化するのであれば、同じ条件で規格化しなければならない。今回は、CoNi と FeNi の合金スペクトルを使用した。従来法では、例えば、合金の例で SOM 作成に使用したサンプルとは異なる合金組成のスペクトル波形を予測することは困難であった。SOM 法を用いた場合、従来法とは異なり、これが出来るのである。具体的には、以下のことが、期待できる。

- SOM 作成に使用したサンプル以外のスペクトルを予測する
- 未知のスペクトルの合金組成を予測する

- スペクトルの2次元マップ (SOM) への写像によるデータの可視化と分類

## 2.1 組成分析

化学実験によく使用されるオージェ電子分光 (AES: Auger Electron Spectroscopy) のスペクトルデータから未知組成の同定を行う。入力データとして CoNi 合金の場合を取り上げ説明する。まず、以下の手順にしたがって前処理をおこなう。

1. AES スペクトルの高エネルギー側からバックグラウンドを引き、590~890 eV のエネルギー範囲での信号値の最大と最小値を用いて各エネルギーでの信号値を規格化する
2. これを SOM\_PAK[2] のデータ書式に準じたファイルにする; ファイルはテキスト形式で第1行には、まず組成、そして、ステップ・エネルギーでの信号値がつづく。

そして、手持ちのデータから基本 SOM マップを作る。SOM は数個のデータからその間にあると思われるデータを造りだし、入力データと同じ次元で蓄えることができる。この SOM マップから入力データに最も近いユニット (BMU: Best Match Unit) を探し出しそのデータを引き出す。具体的には各ユニットとの誤差 2 乗和を計算し、最小のものを BMU としている (式 1)。

$$\min_{e_s} = \sum (x_{in} - m_{ij})^2 \quad (1)$$

元の SOM 作成データに組成情報を入れておくことで、引き出したデータから組成情報を読み取ることが出来る。つまり、入力データの組成情報が補間されることになる。

## 2.2 COMPRO—Common Data Processing System

今回、使用したデータは表面分析研究会 (SASJ—the Surface Analysis Society of Japan (<http://www.sasj.gr.jp/>)) においてラウンド・ロビンデータ<sup>1</sup>として得られたものである。また、データの作成、加工には、その研究会の吉原一紘氏等によって開発された応用ソフト “COMPRO” (<http://www.sasj.gr.jp/> から入手可) を使用した [3]。それは、AES と XPS (X線光電子分光, XPS: X-ray Photoelectron Spectroscopy)

<sup>1</sup>同一のサンプルを使つてのいろいろな研究所で得られた合金のスペクトル

のスペクトルデータを共有して、科学的なジャーナルで発行されるデータ処理手順を評価して、分析器を較正するソフトウェアである。そこでは、AES と XPS のいろいろなスペクトルの加工処理と、それらのデータベースを含んでいる。

我々の解析システムでは、他の処理ソフトでスペクトルを加工された場合には、テキスト形式でデータを挿入しなければならないが、この “COMPRO” で処理したデータの場合には、そのままの形式 (npl 形式) で使用できる。

今、現在は、CoNi 合金と FeNi 合金のみの解析装置であるが、“COMPRO” のデータベースにある周期律表上の各種元素からの XPS のフルスペクトルを利用して、XPS スペクトルからの元素同定もできるように拡張することを予定している。

COMPRO (Common Data Processing System)

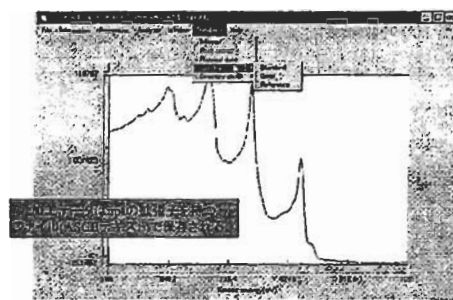


図 1: COMPRO の画面

## 3 システムの概要

今回構築するシステムの概要を図 2 に示す。ユーザーのクライアントとのインターフェイスについては WWW ブラウザを選び、サーバー<sup>2</sup>に構築されたホームページを通してデータを交信する。

サーバーに送られたデータはあらかじめサーバーに用意してある SOM マップの各ユニットと比較し、誤差 2 乗和が最小のユニット (BMU) を探しそのユニットの組成情報をユーザーに返す。同時に、BMU の箇所にラベル付けをした SOM マップ、および入力されたデータと BMU のスペクトルを比較するためのグラフを表示する。

<sup>2</sup>今回のシステムにはサーバーとして 200MHz 動作の CPU を搭載した PC-UNIX のシステムを用いた。

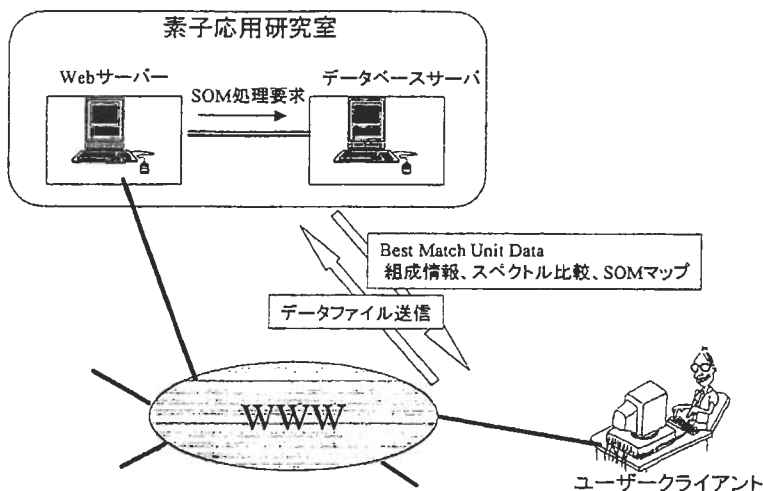


図 2: Web Chemical SOM (Web-CSOM) システム

### 3.1 システムの利用手順

ユーザーは以下の手順にしたがってクライアントとなるコンピュータから本システムを利用することができる。本システムを利用するにはユーザーのコンピュータがインターネットに接続されている必要がある。

#### 1. ホームページへのアクセス

[http://app6.ele.tottori-u.ac.jp/web\\_csom/](http://app6.ele.tottori-u.ac.jp/web_csom/) をアクセスし本システムのトップページを訪れる (図 3を参照)。日本語ページを選択すると日本語の解説のページ (図 4を参照) にジャンプする。

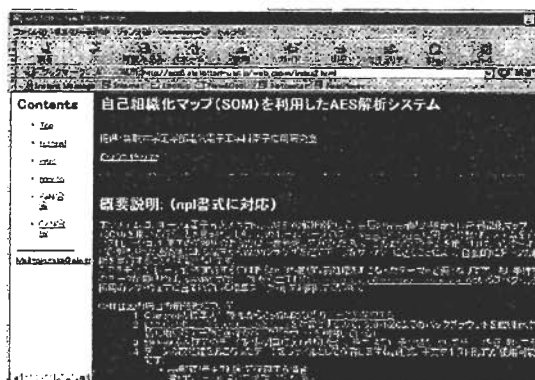


図 4: 日本語解説ページのイメージ。



図 3: ホームページのトップページのイメージ。

#### 2. データファイルの選択

図 4の画面から CoNi 合金のページへいくと図 5に示すページへジャンプする。この図のページで解析に用いるユーザーのデータファイルを選択する。ユーザーは“システムに組み込みのテスト用データを使う”あるいは“ユーザーが準備したデータファイルを使う”の 2つの選択肢から選ぶことができる。後者の場合、テキスト形式および npl 形式に対応したデータの変換をしたファイルをあらかじめ準備しておく必要がある (その詳細はホームページを訪れて確認していただきたい)。



図 5: CoNi 合金の日本語ページのイメージ.

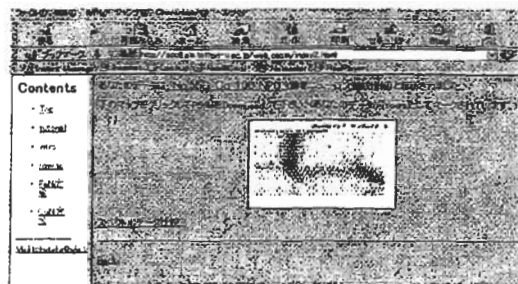
### 3. 解析結果の閲覧あるいはダウンロード

図 5 の処理対象のファイルを選択後, 解析ボタンをクリックすると解析が開始される. 解析には数分が必要で, 無事解析が終了すると次のページ (図 6(a)) に移動する. このページ内の中央の図をクリックすると, 入力したデータが最整合したユニット (BMU) が “[Yours]” とマークされた自己組織化マップが得られる (同図 (b) 参照). また, “スペクトルデータ比較” をクリックすると入力したデータとそれに最整合したユニット (BMU) の示すスペクトルの比較用のグラフが得られる (同図 (c) 参照). 本システムでは図はポストスクリプト形式で作成され, 必要に応じて閲覧<sup>3</sup>もしくはダウンロードすることが可能である.

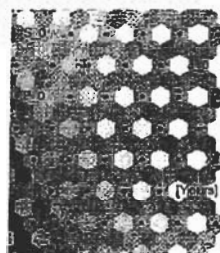
### 3.2 ディレクトリとプログラムの概要

実際に構成したホームページのディレクトリ構成について説明する. /data にはサンプルデータを格納してある. /mysom には使用する SOM マップのファイルを格納しているが将来的にはデータベースから引き出すことになるディレクトリである. /SOMimg には SOM マップの画像を格納しているが, これも将来的に, イメージマップ機能を使って各ユニットをクリックすることでスペクトルが表示されるように, スペクトルを格納したデータベースと連結されるディレクトリである. /us-

<sup>3</sup>ポストスクリプト形式のファイルをコンピュータの画面上で見ると “Ghostview” などのソフトウェアが必要です.

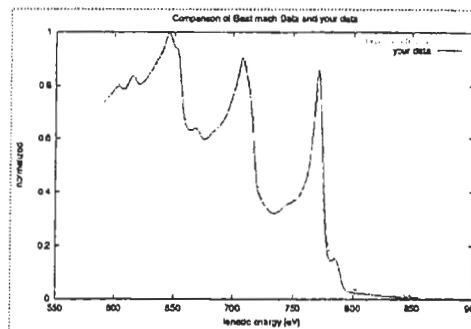


(a) 解析結果の画面イメージ



入力したデータに最整合したユニットの位置が “[Yours]” とマークされる

(b) 自己組織化マップ



(c) 入力データと最整合したユニットの示すスペクトルの比較

図 6: CoNi 合金の解析結果 (日本語) ページのイメージ. (a) 解析直後のページ, (b) 自己組織化マップの拡大図, (c) スペクトルの比較のグラフの例.

rdata は唯一ユーザー書きこみが許可されているディレクトリで送られてくるユーザーのデータや, 解析結果などがここに格納される.



解析のために主要なプログラムは /top ディレクトリにある. 大まかな流れは FeNi, CoNi それぞ

れの入力用のホームページ(拡張子がhtml)から解析用のcgiスクリプト(拡張子がcgi)にファイルが送られて処理を行う。解析用のcgiスクリプト<sup>4</sup>は組成判別の結果を表示するhtml形式のファイルを生成する。その時に、入力ファイルの該当するユニット(BMU)にマークを入れたSOMマップと、BMUのスペクトルと入力ファイルのスペクトルを比較したグラフを作成する。解析上での重要なプログラムは“codX.pl”, “checksom.pl”, “plotdataout.pl”である。これらのプログラムの基本的な働きは以下のとおりである。

- codX.pl ~BMUの調査
- checksom.pl ~BMUの確認
- plotdataout.pl ~比較用グラフの作成

解析用のcgiスクリプトはこれらのプログラムを呼び出し、実行するが、それ以外に以下のことを行う。

- ▷ /usrdataディレクトリの中をすべて消去する。
- ▷ gnuplot<sup>5</sup>を使ってグラフを生成する。
- ▷ umat<sup>6</sup>を使ってBMUの場所にチェックされたSOMマップを生成する。

### 3.3 システムの改良と今後の可能性

2000年5月の時点で本システムは、COMPROのファイル形式(npl形式)をそのまま扱えるように改良してある。本システムはユーザーが比較的アクセスしやすいので、そのデータを2次利用することが可能である(現在はユーザーのデータの2次利用はしていない)。現在は機能していないが、本システムのサーバーの処理は複数のマシンで分散して運営すると効率がよく柔軟性に富んだシステムの構築が可能となる。

近い将来の構想として、データベース・サーバーと今回の試作システムをリンクする予定である。それを図7に示している。同図のデータベース・サーバーを利用すれば、複数のSOMマップやユーザーが送ってきたデータをそのデータベース・サーバーに蓄えることが可能となる。それらを連動さ

<sup>4</sup>cgiスクリプトはプログラム言語Perlで記述

<sup>5</sup>コマンドベースのグラフ作成ツール

<sup>6</sup>SOM\_PAKに収められているSOMマップを生成するプログラム

せることで現在よりも広範なデータへの対応が容易に行えると考えている。現在、CoNi, FeNiの2種の合金組成解析しか行えないという欠点があるが、これはデータベースとリンクしたシステムを構築する際に解決される予定である。

なお、最後に断っておくが、本システムは日々改良されていくので、アクセスしたときに今回紹介したイメージと異なっているかもしれない。

## 4 おわりに

AES波形をWWWを利用して解析するための試作システム(ユーザーとのインターフェース部分)を構築した。本システムはユーザーとのインターフェース部分にWWWを利用したため、対話的な操作をおこなうだけで簡単にSOM法によるスペクトルの解析をおこなうことができる。WWWの性格上、臨機応変にシステムを改良することが可能である。将来的にはデータベース・サーバーとの連携により、今後の発展が期待される。ネットワーク上でのセキュリティを確保した上でこのような解析システムを構築すれば非常に有用なものと成り得ると確信する。

web\_csomのアドレス

[http://app6.ele.tottori-u.ac.jp/web\\_csom/](http://app6.ele.tottori-u.ac.jp/web_csom/)

## 参考文献

- [1] Teuvo Kohonen 著, 徳高平蔵, 岸田悟, 藤村喜久郎 訳: “自己組織化マップ”, シュプリンガー・フェアラーク, 1996年6月。
- [2] 徳高平蔵, 岸田悟, 藤村喜久郎: “自己組織化マップの応用—多次元情報の2次元可視化—”, 海文堂, 1999年2月。
- [3] 吉原一紘: “COMPRO Version6 使用方法”, Journal of Surface Analysis, Vol.6, No.2, 1999年6月。

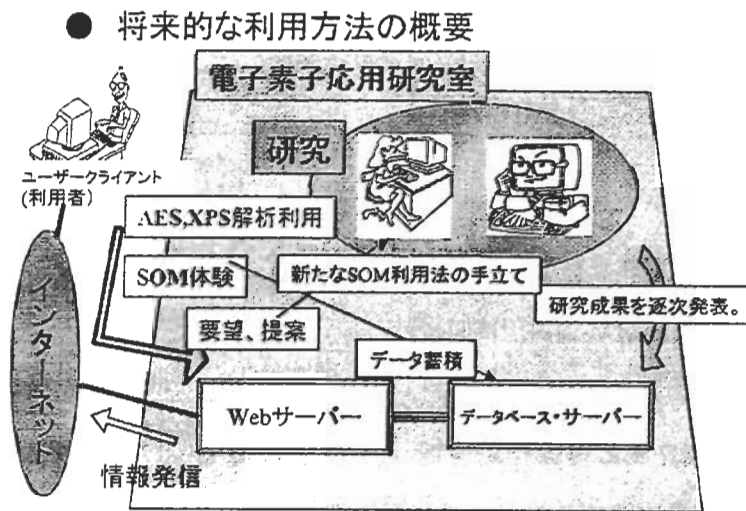


図 7: 本システムの将来的な活用の概観. データベースの活用が重要な鍵を握る.