

線形回帰機械学習による 3 成分系試料のレーザー誘起ブレイクダウン発光スペクトルの解析

Analysis of Laser-Induced Breakdown Spectroscopy
of Three-Component Samples Using Linear Regression Machine Learning

*赤岡 克昭¹, 狩野 貴宏¹, 若井田 育夫¹, 大場 弘則¹

¹ 日本原子力研究開発機構 (JAEA)

福島第一原子力発電所事故により発生した燃料デブリ等のその場分析におけるレーザー誘起ブレイクダウン分光分析法 (LIBS) の分析手法として、機械学習による定量分析法の評価を行っている。これまでの発表では、LIBS によって得られた U/Pu 混合試料のスペクトルを用いて、予測直線に対して、その内挿/外挿、ノイズの影響、スペクトルの波長のずれの影響、スペクトル幅の影響について評価してきた。これらを踏まえ、本報告では $\text{UO}_2/\text{ZrO}_2/\text{Fe}_3\text{O}_4$ の 3 元素混合酸化物試料のスペクトルを用いて、線形回帰機械学習による定量分析を試みた結果について報告する。

キーワード：燃料デブリ、機械学習、LIBS、レーザー、定量分析、ウラン、ジルコニウム、鉄

1. 緒言

LIBS の定量解析法として、検量線法、最小二乗法、キャリブレーションフリー及びニューラルネットワークによる機械学習等々を評価してきた。機械学習は膨大な教師データが必要であること、一方、単独スペクトルや最小二乗法による検量線法は線形性の良い予測ができることから、モデルとして線形回帰モデルを仮定した機械学習について評価してきた。これまで、2 成分系において優れた定量分析が可能であったことから、3 成分系に拡張して機械学習を試みた。

2. 線形回帰モデルへの機械学習の適用

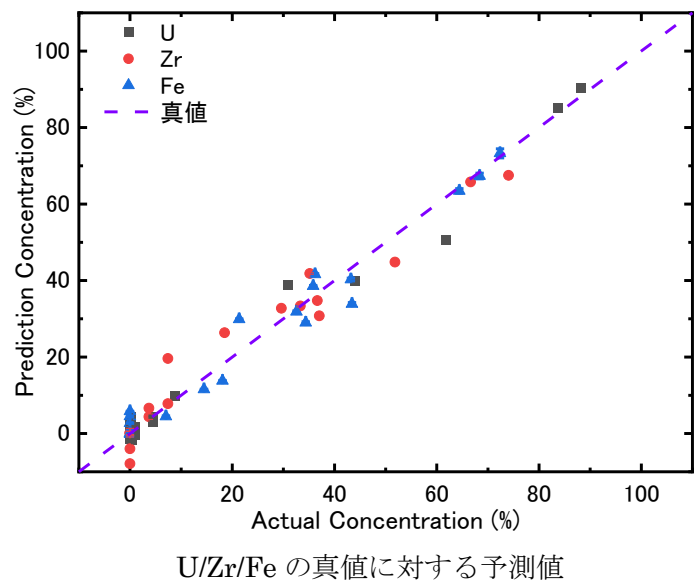
LIBS で測定した測定スペクトル j の各波長 λ_i の光強度を I_i 、その係数を a_i とする時、ある成分の濃度 Conc_j は、以下の式で表される。

$$\text{Conc}_j = \sum_i a_i \cdot I_i$$

スペクトル強度の重みとして得られる係数 a_i を機械学習により求めることで、この測定スペクトル j と濃度 Conc_j の関係を導き出す。

3. 解析結果

$\text{UO}_2/\text{ZrO}_2/\text{Fe}_3\text{O}_4$ をそれぞれ 0~100% を混合した異なる濃度 15 種類の試料について LIBS で測定したスペクトルデータを解析対象として用いた。各濃度の実測スペクトル 50 本のうち各 40 本を教師データとし、残りの各 10 本をテストデータとして 3 成分系の線形回帰機械学習の検証を実施した。U/Zr/Fe、それぞれの実濃度に対する予測濃度の結果を上図に示す。ばらつきはあるが予測値は真値に近い値を示し、3 成分系でもある程度の濃度の推定が可能であることが判った。詳細は、講演で報告する。



*Katsuaki Akaoka¹, Takahiro Karino¹, Ikuko Wakaida¹ and Hironori Ohba¹

¹Japan Atomic Energy Agency (JAEA).