

## 自己符号化器(autoencoder)を用いた高分子試料の TOF-SIMS データ解析

○伊藤 克<sup>1</sup>, 山岬 崇之<sup>1</sup>, 青柳 里果<sup>2\*</sup><sup>1</sup>成蹊大学理工学部

## Evaluation of TOF-SIMS data of three-polymer layers using autoencoder

○Masaru Ito<sup>1</sup>, Takayuki Yamagishi<sup>1</sup> and Satoka Aoyagi<sup>1\*</sup><sup>1</sup>Graduate of Science and Technology, Seikei University

## 1. はじめに

TOF-SIMS は 100 nm 程度の高空間分解能で化学イメージングが可能な高感度表面分析法だが、分子のフラグメント化やマトリックス効果の影響によって、質量スペクトルが複雑で解釈が難しい場合が多く、これまで多変量解析などデータ解析法の応用[1,2]がされてきた。TOF-SIMS データの解析において、多変量解析には、主成分分析 (principal component analysis; PCA) や、多変量スペクトル分解 (multivariate curve resolution; MCR) が用いられてきたが、これらは線形的なモデルであり、非線形現象であるマトリックス効果など、複雑な試料に対応できない。そこで本研究では、近年注目されている人工ニューラルネットワークを用いた。教師なし手法の一つであり、非線形的なモデルの作成が可能な自己符号化器(autoencoder)[3]を用いて、TOF-SIMS で得られた 4 層の高分子データの抽出、分類をすることによって、TOF-SIMS データの解析における自己符号化器の有用性を評価した。

## 2. 実験方法

3 種類の高分子 polyethylene terephthalate (PET), polystyrene(PS), polycarbonate(PC)を4層に重ねた試料の TOF-SIMS データ[1]をモデル試料データとした。自動検索した 507 個の質量ピークの各ピクセルでの二次イオン強度を 507×16384 行列データとして数値化した。データ前処理として、各ピクセルでの総二次イオン強度による規格化、全スペクトルにおける最大強度ピークによる規格化、標準化、ポアソンスケールリングなどを行なったデータを用意した。

自己符号化器による解析は Tensor Flow, Python 及び、Deep Learning Toolbox, MATLAB (Mathworks Inc.) 上で行った。Matlab の Deep Learning Toolbox による自

己符号化器では、スパース正則化が含まれているため、正則化の有無を比較するために、Python 上では、正則化なしの条件で解析した。

## 3. 結果と考察

自己符号化器によって分類された特徴の例を Fig. 1. (b)に示す。

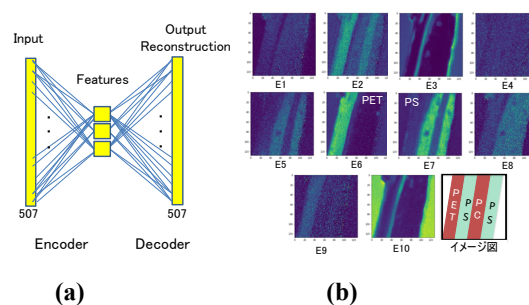


Fig.1. (a) Schematic model of autoencoder, (b)the features extracted by autoencoder (field of view: 300  $\mu$ m)

高分子を分類するために最適なデータ前処理法、伝達関数、ハイパーパラメータの設定などを検討した結果、自己符号化器を用いても、以前の多変量解析による解析結果[1]と同様に、3種類の高分子が別々に分類できることが示され、TOF-SIMS データの解析において、自己符号化器は有用であることが示された。

## 文 献

- 1) Y. Yokoyama, T. Kawashima, M. Ohkawa, H. Iwai and S. Aoyagi, Surf. Interface Anal., **47** 439 (2015).
- 2) M. Ito, Y. Kuga, T. Yamagishi, M. Fujita and S. Aoyagi: Biointerphases **15**, 021010 (2020)
- 3) K. Matsuda and S. Aoyagi: Biointerphases **15**, 021013 (2020).

\*E-mail: aoyagi@st.seikei.ac.jp