



HOKKAIDO UNIVERSITY

Title	環境調和型鉱山操業におけるハイパースペクトルイメージングと機械学習を用いた重金属鉱物検出に関する研究
Author(s)	岡田, 夏男
Degree Grantor	北海道大学
Degree Name	博士(工学)
Dissertation Number	甲第16354号
Issue Date	2025-03-25
DOI	https://doi.org/10.14943/doctoral.k16354
Doc URL	https://hdl.handle.net/2115/95072
Type	doctoral thesis
File Information	Natsuo_Okada.pdf



環境調和型鉱山操業におけるハイパースペクトルイメージングと
機械学習を用いた重金属鉱物検出に関する研究

(Study on Detection of Heavy Metal Minerals Using Hyperspectral
Imaging and Machine Learning in Environmentally Harmonized
Mining Operations)

北海道大学大学院工学院環境循環システム専攻

岡田夏男

要旨

現代社会においては、脱炭素社会の実現に向け環境に配慮した金属資源の安定的な供給が欠かせない。しかし、持続可能な資源開発への取り組みは未だ不十分で、深刻な環境問題が発生している。本論文では、ハイパースペクトルイメージングおよび機械学習を活用した重金属鉱物検出に関する研究を行った。重金属鉱物は、人体及び周辺環境に悪影響を及ぼす場合がある。それを人間の目の数十倍という高い波長分解能を持つハイパースペクトルデータを用いることによって検出する。ハイパースペクトルデータはその複雑なデータ構造により、データ処理・解析には高度な機械学習アルゴリズムの適用が必要不可欠である。しかしながら、重金属鉱物を検出するための解析手法は確立されておらず、また、検出フローは最適化されていない。本研究では、(i) 重金属鉱物を検出するハイパースペクトルイメージングベースの AI モデルの開発及び (ii) 検出フローを最適化するアプリケーション・プロトコルの開発を行った。提案された手法は、鉱業活動によって生じる重金属汚染地域のモニタリングに貢献し、環境調和型鉱山操業を強力に先導する。

本論文は下記に示される章によって構成される。

第 1 章では、本研究の背景について、特にハイパースペクトルイメージングを用いた鉱害モニタリングについての概要が述べられ本論文の重要性を強調した。また、先行文献調査を通じて、関連する研究動向と課題を整理した。

第 2 章では、ハイパースペクトルデータの解析に適した機械学習手法についての考察が加えられている。ハイパースペクトルデータは高い識別性能を持つことが実証されているものの、そのデータ構造は複雑であり、データ処理・解析には機械学習が不可欠である。本章では、10 種類の機械学習モデル（CNN、ツリー、判別、ロジスティック回帰、ナイーブベイズ、SVM、KNN、アンサンブル、浅層ニューラルネットワーク、カーネル近似）を用い、4 つの代表的なデータセット（Indian Pines、Salinas、Pavia University、Botswana）を対象に分類性能を比較した。

第 3 章では、ハイパースペクトルデータ解析を支援するユーザフレンドリな解析アプリ「AI Powered Intelligence Spectrum Analyzer (APiS)」を紹介する。ハイパースペクトルデータは数百のスペクトル波長を含み、鉱物種を特定する強力なツールである一方、データの複雑性が一般ユーザにとって扱いにくい課題となっている。この問題を解決するため、コーディング不要のインタラクティブな解析環境として APiS を開発した。APiS はデータの可視化、学習データ生成、高度な機械学習分析、モデル評価を可能とする直感的なインターフェースを備えユーザ金分野の多様なユーザが容易に利用できる環境を提供する。

第 4 章では、鉱物種を同定するためのアルゴリズムについて述べる。深層学習を活用することで、ハイパースペクトルデータから各鉱物に固有のスペクトルパターンを抽出・解析し、非破壊で迅速な鉱物種の同定を実現する。本章では、提案手法により従来の RGB 画像解析で 30% だった識別精度を、ハイパースペクトルデータ解析によって 90% 以上に向上させた結果を示す。

第 5 章では、AI の判定根拠の可視化及び次元削減手法の提案を行った。ケーススタディとして鉱物中のヒ素品位推定を扱った。低品位鉱物に含まれるヒ素（As）は環境汚染リスクを伴うため、非破壊的かつ高精度な検出技術が求められる。本章では、深層学習とハイパースペクトルイメージングを組み合わせた

システムを提案し、近傍成分分析（NCA）による次元削減、また CNN の逆解析による判定根拠の可視化手法が新たに示された。

第6章では、リモートセンシングデータを解析するためのプロトコルを提案した。人工衛星やドローンによる異高度データの統合により、従来のスペクトルデータでは困難だった高解像度スペクトルマップの生成を実現した。本プロトコルは画像レジストレーション技術を活用し、より精確な土地汚染モニタリングを可能にするものである。

第7章では、本研究の成果と意義を総括した。本研究では、ハイパースペクトルイメージングおよび機械学習を組み合わせ、重金属鉱物の検出を行い、また、検出フローを最適化した。本提案のアプリケーション・プロトコルは、鉱業活動に起因する金属汚染地域のモニタリングを支援し、持続可能で環境調和型の鉱山操業を先進的に牽引する役割を果たす。

目次

要旨	2
List of Figures.....	7
List of Tables.....	10
略語	11
1. 序論	12
1.1. 背景	12
1.2. 産業ごとのハイパースペクトルイメージングの応用事例	14
1.3. 鉱業分野におけるハイパースペクトルイメージングの応用事例.....	15
1.3.1. 探査.....	16
1.3.2. 生産・開発.....	16
1.3.3. 選鉱.....	16
2. 機械学習アルゴリズムの比較と最適化	19
2.1. 本章の背景	19
2.1.1. データセット	19
2.1.2. ハイパースペクトルデータの処理方法.....	19
2.1.3. Indian Pines.....	21
2.1.4. Salinas (Salinas scene corrected).....	22
2.1.5. Pavia University.....	22
2.1.6. Botswana	22
2.1.7. 精度.....	22
2.1.8. 機械学習アルゴリズム	23
2.2. 結果と考察	24
2.2.1. CNN	25
2.2.2. 決定木.....	25
2.2.3. 線形判別分析	26
2.2.4. ロジスティック回帰	26
2.2.5. ナイーブベイズ	26
2.2.6. SVM.....	26
2.2.7. KNN	26
2.2.8. アンサンブル学習.....	26
2.2.9. (浅い) ニューラルネットワーク	26
2.2.10. カーネル近似.....	27
2.3. 最適な機械学習モデルに関する結論	29
3. ハイパースペクトルデータ解析アプリの開発.....	30
3.1. 本章の背景	30
3.2. APiS の概要.....	30

3.3.	既往研究	31
3.4.	方法	32
3.4.1.	開発環境	32
3.4.2.	UI / UX デザイン	32
3.4.3.	アルゴリズムの実装	34
3.5.	ケーススタディ	40
3.5.1.	鉱物設定	40
3.5.2.	データセットの準備	42
3.6.	結果と考察	42
3.6.1.	分類タスク	42
3.6.2.	機械学習による分類の限界	48
3.6.3.	回帰タスク	48
3.7.	構築された解析アプリ APiS に関する結論	55
4.	鉱物種・粒径の同定フレームワークの開発	57
4.1.	本章の背景	57
4.2.	理論	59
4.3.	試料・方法	62
4.3.1.	RGB 画像撮影	62
4.3.2.	ハイパースペクトル画像撮影	63
4.3.3.	実験	63
4.3.4.	取得データ	65
4.4.	結果	66
4.4.1.	RGB 画像に対する深層学習を用いた解析	66
4.4.2.	深層学習を用いたハイパースペクトルデータの解析	69
4.5.	考察	74
4.6.	深層学習を用いた鉱物同定モデルに関する結論	77
5.	ハイパースペクトルイメージングと深層学習を用いた次元削減・判定根拠可視化アルゴリズムの開発：硫砒銅鉱を用いたケーススタディ	78
5.1.	本章の背景	78
5.1.1.	既往研究	79
5.2.	方法	80
5.2.1.	NCA	80
5.2.2.	ハイパースペクトルデータの取得方法	80
5.2.3.	実験方法	80
5.2.4.	実験対象	82
5.3.	実験結果	83
5.4.	深層学習による学習モデルの作成	84
5.4.1.	ハイパースペクトルデータに対する深層学習	84

5.4.2.	混合行列について.....	85
5.5.	CNN と NCA による特徴抽出.....	86
5.5.1.	CNN による特徴抽出.....	86
5.5.2.	NCA による特徴抽出.....	88
5.6.	抽出された波長データを用いた機械学習結果.....	90
5.6.1.	ハイパースペクトルデータに対する機械学習.....	90
5.6.2.	機械学習手法の比較.....	92
5.7.	考察.....	93
5.7.1.	深層学習による同定根拠の特定.....	93
5.7.2.	CNN の重み解析.....	95
5.8.	ヒ素同定のための深層学習アルゴリズムに関する結論.....	96
6.	異高度スペクトル画像レジストレーションプロトコルの開発.....	98
6.1.	本章の背景.....	98
6.1.1.	既往研究.....	99
6.2.	方法・材料.....	100
6.2.1.	異高度スペクトル画像レジストレーションプロトコル。.....	100
6.2.2.	デジタルツインプラットフォーム.....	102
6.2.3.	スペクトルデータの射影歪み.....	102
6.2.4.	スペクトル画像レジストレーション.....	104
6.2.5.	鳥瞰画像変換プロセス.....	105
6.2.6.	全体プロセス.....	107
6.3.	提案するシステムの構成例.....	108
6.3.2.	鳥瞰画像変換.....	110
6.4.	今後の課題.....	113
6.5.	異高度スペクトルデータのレジストレーションに関する結論.....	114
7.	結論.....	115
	参考文献.....	117
	謝辞.....	129

List of Figures

Figure 1 Schematic diagram of human eye and hyperspectral camera.....	14
Figure 2 Examples of industries using HSI.	15
Figure 3 Mine development stages.....	15
Figure 4 Overview of the study.	18
Figure 5 Schematic of data cube and table data.	20
Figure 6 Spectral plots of (a) Indian Pines, (b) Salinas, (c) Pavia U, and (d) Botswana.	21
Figure 7 Number of datasets for each class.....	21
Figure 8 Confusion matrix.	23
Figure 9 Categories of machine learning.	23
Figure 10 Schematic diagrams of machine learning models.	24
Figure 11 Indian pines segmentation results.	27
Figure 12 Salinas segmentation results.	28
Figure 13 Pavia university segmentation results.....	28
Figure 14 Botswana segmentation results.....	29
Figure 34 Overview of APiS.....	31
Figure 35 Overview of MATLAB App Designer.....	32
Figure 36 Overview of APiS app.....	34
Figure 37 ROI selection and averaging spectral process.....	35
Figure 38 Architecture of 1D-CNN.....	38
Figure 39 How to show spectral using the App.....	41
Figure 40 Spectral features of the samples.....	41
Figure 41 (a) input label name and (b) select label area.....	42
Figure 42 Result of machine learning for classification task.	43
Figure 43 Confusion matrix and TPR/FNR of Quadratic Discriminant analysis.	43
Figure 44 ROC curve of Quadratic Discriminant analysis.....	44
Figure 45 Segmentation result.	45
Figure 46 Difference between Ground Truth and segmented results.	45
Figure 47 Training progress of CNN.....	46
Figure 48 Confusion matrix of CNN.....	46
Figure 49 Segmentation result of CNN.....	47
Figure 50 Difference between ground truth and segmented result.	47
Figure 51 Cosine similarity of spectrum.	48
Figure 52 Samples for regression analysis.....	49
Figure 53 Labelling and ROI selection.....	49
Figure 54 MAE for validation and test dataset.....	51
Figure 55 MSE for validation and test dataset.	51

Figure 56 RMSE for validation and RMSE dataset.	52
Figure 57 R Squared for validation and test dataset.....	52
Figure 58 Predicted responses vs True responses.....	53
Figure 59 (a) Test sample's RGB image and (b) segmented result using Fine Gaussian SVM.....	54
Figure 60 Training progress of regression CNN.....	55
Figure 61 (a) Test sample's RGB image and (b) segmented result using CNN.	55
Figure 15 Schematic diagram of mineral processing using hyperspectral imaging and deep learning classification.....	57
Figure 16 Structure of the convolutional neural network (CNN) for red, green, and blue (RGB) images.	60
Figure 17 Structure of the CNN for hyperspectral data.....	60
Figure 18 An architecture of GoogLeNet. An architecture of GoogLeNet.....	61
Figure 19 Five types of minerals for classification: (a) hematite large particles, (b) hematite small particles, (c) hematite very small particles, (d) galena, and (e) chalcopyrite.	63
Figure 20 Arrangement of the experiment: (a) schematic diagram of experiment, and (b) photo of the set-up of experiment.	64
Figure 21 Processing of the hyperspectral data for deep learning.	65
Figure 22 Averaged obtained hyperspectral data of each mineral.....	66
Figure 23 The difference between (a) an RGB image and (b) hyperspectral imaging.	66
Figure 24 (a) Learning curve of the RGB images using deep learning. (The horizontal axis shows the iteration and the vertical axis shows the accuracy of classification. The blue line shows the accuracy for the learning data set and the black dots represent the accuracy for the verification data set.) (b) The loss function of RGB images using deep learning. (The horizontal axis shows the iteration and the vertical axis shows the loss of classification. The orange line shows the loss for the learning data set and the black dots represent the loss for the verification data set.).....	68
Figure 25 Confusion matrix for the RGB image deep learning results for the test data.	69
Figure 26 The learning curve of deep learning for hyperspectral data. (The horizontal axis shows the iteration and the vertical axis shows the accuracy of classification. The blue line shows the accuracy for the learning data set and the black dots represent the accuracy for the verification data set).	71
Figure 27 Confusion matrix of the deep learning results for two types of rocks using test data.	72
Figure 28 The learning curve of deep learning for three types of minerals. (The horizontal axis shows the iteration and the vertical axis shows the accuracy of classification. The blue line shows the accuracy for the learning data set and the black dots represent the accuracy for the verification data set.).	72
Figure 29 Confusion matrix for three different types of grain sizes of test data.	73
Figure 30 The learning curve of deep learning for five types of minerals. (The horizontal axis shows the iteration and the vertical axis shows the accuracy of classification. The blue line shows the	

accuracy for the learning data set and the black dots represent the accuracy for the verification data set.).	74
Figure 31 Confusion matrix of the deep learning results.	74
Figure 32 Comparison between the ground truth spectrum and misclassified spectrum of (a) galena, (b) chalcopyrite, (c) hematite large particles, (d) hematite small particles, and (e) hematite very small particles. The solid line shows the ground true spectrum and the broken line shows.	75
Figure 33 Results of the Grad-CAM analysis for the deep learning results.	76
Figure 62 Scenery of experiment.	81
Figure 63 Outline of data acquisition.	81
Figure 64 Pre-processing of hyperspectral data.	82
Figure 65 RGB images of samples.	82
Figure 66 Spectrum data of test data ABC.	84
Figure 67 Confusion matrix of deep learning result.	85
Figure 68 Structure of CNN.	87
Figure 69 Weights of each wavelength regions of spectrum A1 to C4.	88
Figure 70 Sum of weight.	88
Figure 71 Weight analyzation by NCA.	90
Figure 72 Confusion matrix of QDA result.	93
Figure 73 RGB images of test samples.	94
Figure 74 Spectrum data of test samples.	95
Figure 75 Hyperspectral data of ABC and Weight.	96
Figure 76 Flowchart of the proposing protocol.	101
Figure 77 Digital Twin for mining.	102
Figure 78 Bird's eye transformation.	104
Figure 79 Schematic diagram of image registration.	105
Figure 80 A schematic diagram of control points selection and image registration.	107
Figure 81 How the proposed system works.	108
Figure 82 A constructed 3D model.	110
Figure 83 Results of the bird eye transformation for hyperspectral data.	111
Figure 84 Image registration for drone camera images.	112
Figure 85 Control points selection shows as False RGB images.	113
Figure 86 An overview of the result showed as False RGB images.	113

List of Tables

Table 1 Mine pollution in the world.	13
Table 2 Applications of HSI for mining development.....	17
Table 3 Pseudocode for hyperspectral data processing.....	20
Table 4 Results of the machine learning test.	25
Table 10 List of machine learning algorithms for classification task.	35
Table 11 List of machine learning algorithms for regression task.....	36
Table 5 Layers of CNN use for hyperspectral data analysis.....	62
Table 6 Data set of the RGB images.	67
Table 7 Result of deep learning for RGB images for the learning data.....	68
Table 8 Hyperspectral data set.....	70
Table 9 Learning options of deep learning. ADAM (adaptive moment estimation).	70
Table 12 Detection systems for sensor-based sorters and exemplary applications in mining.	79
Table 13 Chemical composition of target minerals.....	83
Table 14 Result of deep learning.....	85
Table 15 Layer information.	87
Table 16 Machine learning results using extracted data.	91
Table 17 Chemical composition of test samples.	93
Table 18 Deep Learning results of test samples.	95
Table 19 Spectral dataset.	102

略語

HSI: Hyperspectral imaging
MSI: Multispectral imaging
RGB: Red, Green, and Blue
CNN: Convolutional Neural Network
SVM: Support Vector Machine
KNN: k-nearest neighbor algorithm
XRD: X-ray diffraction
XRF: X-Ray Fluorescence
ADAM: Adaptive Moment Estimation
SGDM: Stochastic Gradient Descent Moment
Grad-CAM: Gradient-weighted Class Activation Mapping
GUI: Graphical User Interface
APiS: AI Powered intelligence Spectrum analyzer
MAE: Mean Absolute Error
MSE: Mean Squared Error
RMSE: Root Mean Squared Error
SLO: Social License to Operate
SBOS: Sensor Based Ore Sorting
NCA: Neighborhood Components Analysis
ICP: Inductively Coupled Plasma
LDA: Linear discriminant analysis
QDA: Quadratic Discriminant Analysis
As: Arsenic
CS: Component Substitution
MRA: Multiresolution Analysis
SURF: Speeded Up Robust Features
UAV: Unmanned Aerial Vehicle
SfM: Structure from Motion

1. 序論

1.1. 背景

先史から現代にかけて鉱業は人類の生存に不可欠な産業であった一方で、持続可能性と人類文明の発展の狭間に倫理的問題として鉱害が存在し続けている。鉱害は鉱山開発の全てのプロセスにおいて生じる可能性があり、流出した有害物質によって水質、土壌、大気汚染が引き起こされ、その結果として周辺環境や人体に深刻な影響を与える。我が国においては、特に工業の近代化が加速した 18 世紀以降深刻な鉱害問題が発生している。栃木県足尾銅山で発生した鉱毒事件は日本の公害の原点として知られ、銅・カドミウムなどを含む鉱山廃水を直接河川に放流したことによって周辺環境を汚染し多くの人々に健康被害をもたらした[1], [2]。また、富山県神岡鉱山から排出されたカドミウムは神通川の水や流域を汚染し、汚染された農作物を通じて体内に入りカドミウムを中心とする重金属の慢性中毒症（イタイイタイ病）を引き起こした。女性に多く発症し、骨折を繰り返すことが特徴で激しい痛みを引き起こした[3], [4]。宮崎県旧土呂久鉱山では、硫砒鉄鉱の製錬プロセスで排出された大気・河川に排出されたヒ素によって鉱害問題が発生した。周辺住民に慢性砒素中毒症の健康被害が生じた他、川魚や農作物、家畜などに被害を与えた[5], [6]。地下鉱物資源は産業の発展を支えてきた一方、その代償として長期的な環境破壊を引き起こし人々の健康に深刻な影響を与えてきた。現在では国内鉱山のほとんどが操業を停止していることから（休廃止鉱山の廃水処理は綿々と続いているものの）、鉱害問題は我が国においては過去の歴史上の問題としてみなされる傾向にある。

しかし海外においては、現代でも鉱害問題が生じている。2010 年にはナイジェリア Zamfara 州において金鉱石処理に関連する鉛汚染が生じた。臨床報告によれば 3 万人以上の住民に影響を与え特に子供の血中鉛レベルが前例のないほど高いことが示されており長期にわたる健康被害が生じた[7], [8]。2015 年にはブラジル Marina 市において Fundão 尾鉱ダムの崩壊事故（the Samarco disaster）が発生し、河川によって運ばれた有害物質は沿岸環境の海洋生態系に深刻な影響を与えた。その 3 年後の 2019 年には同国 Brumadinho 鉱山において尾鉱ダムが崩壊し、2020 年 1 月時点で 259 人が死亡したほか、森林及び農業地域を荒廃させた[9]。その他にも Table 1 に示すように、1950 年代以降も世界中で鉱害が多発しており、鉱害は決して過去の出来事ではなく現在も続く深刻な課題である。

中国やインドなどの新興国の台頭や資源保有国における資源ナショナリズムの高揚により、世界的に地下資源の獲得競争は激化している。特に発展途上国においては、効率・経済性のみを重視した鉱山開発が進む一方で、開発中・閉山後の環境対策に十分な資金が投じられず地元コミュニティに負担が押し付けられる状況が続いている。資源輸出国が輸入国の鉱害汚染を肩代わりしている構図となっており国際的な不平等が生じている。

歴史的な鉱害問題からも明らかなように、鉱山操業によって発生する重金属による汚染は、水・食物を通じて人体に蓄積し永続的な悪影響を与えてしまう。したがって鉱山操業によって排出される重金属の除去とともに、排出された重金属物質のモニタリングは鉱業が地域社会と共生するための重要な課題である。持続可能な鉱業操業、特に鉱害の防止は、国連が掲げる SDGs の目標 6（安全な水とトイレを世界中に）や目標 11（住み続けられるまちづくりを）、目標 12（つくる責任、つかう責任）、目標 14（海の豊かさを守ろう）、目標 15（陸の豊かさを守ろう）と密接に関連している[20]。鉱害の抑制は、地域社会の健康リスクの軽減に寄与するだけでなく、鉱業と地域社会の持続的な共生を可能にし、地域経済の安定化にも寄与する。

Table 1 Mine pollution in the world.

Mining site	Location		Pollution Type	Description	Year
Wittenoom (Asbestos contamination)	Western Australia, Australia		Blue asbestos - Airborne fibers	Long-term exposure risk from airborne asbestos fibers [10]	1966
Ok Tedi Mine	Papua Guinea	New	Copper, Gold - Heavy metals in the river	Continuous pollution due to mine operations and waste disposal [11]	1984
Marinduque (Marcopper Mining Disaster)	Marinduque, Philippines		Copper - Mine tailing spills	Mine tailings leak due to a drainage plug failure [12]	1996
Baia Mare	Baia Mare, Romania		Gold - Cyanide spill in river	Spillage of cyanide into rivers due to dam failure [13]	2000
Kingston Fossil Plant	Tennessee, USA		Coal ash - Sludge spill	Coal ash pond dike rupture, releasing ash slurry [14]	2008
Talvivaara Mine	Sotkamo, Finland		Nickel, Zinc - Sulfate and heavy metal leakage	Leakage of hazardous substances from waste ponds [15]	2012
Mount Polley Mine	British Columbia, Canada		Gold, Copper - Tailings into water bodies	Tailings pond breach leading to large-scale water contamination [16]	2014
Gold King Mine	Colorado, USA		Gold - Release of contaminated water	Accidental release of three million gallons of contaminated water [17]	2015
Bento Rodrigues (Samarco Mine)	Minas Gerais, Brazil		Iron Ore - Tailings dam failure	Tailings dam burst, releasing toxic sludge into the environment [18]	2015
Ajitgarh (Fly ash pond breach)	Rajasthan, India		Coal - Ash slurry into river	Breach of ash pond dike, contaminating local water bodies [19]	2019

近年、ハイパースペクトルイメージング技術と機械学習を活用した重金属検出技術に注目が集まっている。ハイパースペクトルイメージングとは、人間の目の数十倍という高い波長分解能を持った光検出器を用いることによって物質の光学特性をより詳細に調べることができるイメージング技術である。人間の視覚は三色覚として知られているが、これは3種類の錐体視細胞による光の知覚を表す言葉である。3種類の錐体視細胞は、L錐体（長波長：400～700nm）、M錐体（中波長：400～670nm）、S錐体（短波長：390～530nm）と呼ばれる。光によって励起された錐体からの信号は、神経節細胞を介して視神経に

伝達され、脳の視覚野でさらに処理されることで、色彩感覚を生み出す。これら 3 つの感度曲線が連動することで、Figure 1 に示すように、色の知覚が容易になる[21], [22]。対照的に、HSI はカメラで捉えた光のスペクトル強度を測定するために光検出器を使用することで数百バンドという高い波長分解能を達成している。HSI データセットは、赤、青、緑の波長で構成される RGB 画像から得られるデータセットよりも桁違いに大きい。HSI データの解釈は、冗長性が高く、隣接スペクトル間の相互関係を含むデータ構造が複雑であるため困難である。従って膨大かつ複雑なデータを機械学習で処理することによって肉眼での識別能力をはるかに超える識別性能を持ち、特に重金属検出において強力な性能を発揮する可能性がある。

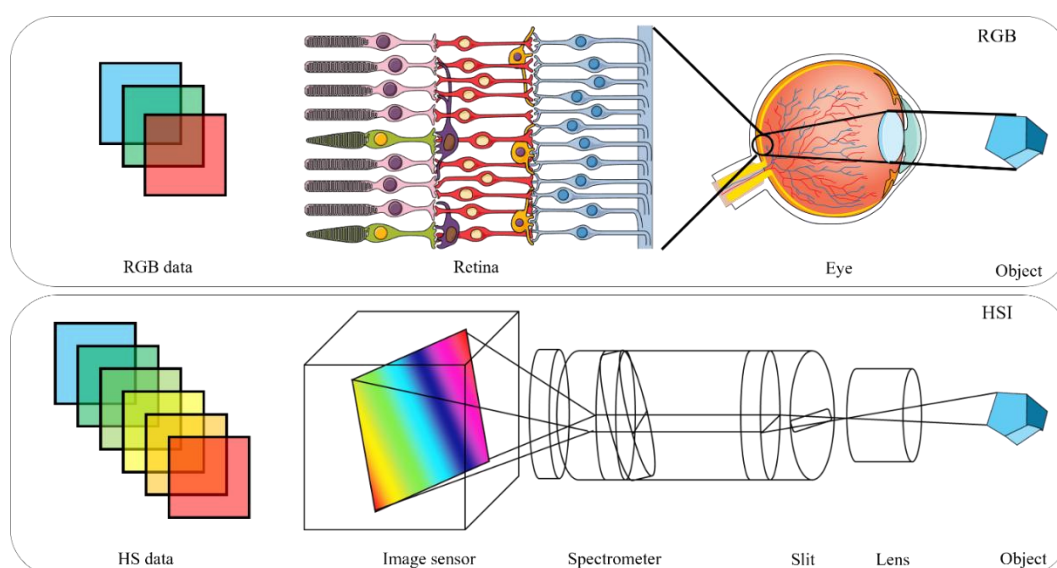


Figure 1 Schematic diagram of human eye and hyperspectral camera.

1.2. 産業ごとのハイパースペクトルイメージングの応用事例

1970 年代の登場以来、ハイパースペクトルイメージング (Hyperspectral Imaging: HSI) は Figure 2 に示すように多くの産業で採用されてきた。例えば医療分野では、HSI は癌や腫瘍の状態を把握し、外科手術を容易にし、歯の健康状態を評価するために利用されている[23], [24], [25], [26]。宇宙産業では、主に人工衛星に搭載されたハイパースペクトルカメラを用いてリモートセンシングが行われている。Qian ら (2021) が報告しているように、現在、ハイパースペクトルカメラを搭載した衛星が少なくとも 26 基稼動しており、このうち 19 基が地球を周回している。残りの衛星は地球の軌道外に位置し、月、火星、金星、水星へのミッションに従事している[27]。地表のスペクトルを分析することで、鉱物や植生などの分布を明らかにすることができる[28]。海洋産業においては、衛星や航空機搭載のハイパースペクトルカメラが、水中の生物多様性、生息地、水質などの分析に利用されている[29]。さらに、無人水中航行体 (UUV) は、深海鉱物の探査、水中考古学、生息地のマッピングなど、さまざまな目的に利用されている[30]。農業の分野では、この技術は、植生のマッピング、作物の病気やストレスの特定、収穫量の検出、植物成分の特定、果実の成熟度の判定など、多くの目的に利用されている。この技術は、農産物の安全性や品質の評価にも使われている[31], [32], [33]。美術・芸術の分野では、HSI の非侵襲的な性質が、美術品の研究や文化遺産のモニタリングなどの研究目的に採用されている[34], [35]。異常検出システム

は、製造業での応用のために提案されてきた。近隣の背景とは異なるハイパースペクトル・シグネチャを検出するように設計されたものもあれば、より高度な処理を実行するために機械学習を採用したものもある[36]。軍事・防衛用途では、監視、隠れた特徴の検出、カモフラージュ、化学物質の識別、地雷探知などの分野で採用されている[37]。HSI には、従来のイメージング技術では捉えることのできない物理的な特性状態を、高精度、非破壊、非接触で可視化できるという利点がある。これらの利点は、産業界における幅広い応用を後押ししている。



Figure 2 Examples of industries using HSI.

1.3. 鉱業分野におけるハイパースペクトルイメージングの応用事例

鉱業には、地表に存在する天然固形鉱物の採掘、管理、加工に関するさまざまなプロセスが含まれる。鉱業は世界経済において重要な役割を担っており、エネルギー生産や化学製造などの他のセクターにも影響を及ぼしている。同様に、鉱業界でも HSI の利点を生かすべく、現在数多くの研究が行われている。Figure 3 に示すように、鉱業は、探鉱、開発、鉱物処理（選鉱）、閉山、リハビリの 4 つの主要なカテゴリに分類することができる。それぞれの段階において、HSI の応用の可能性に関する研究が行われている。

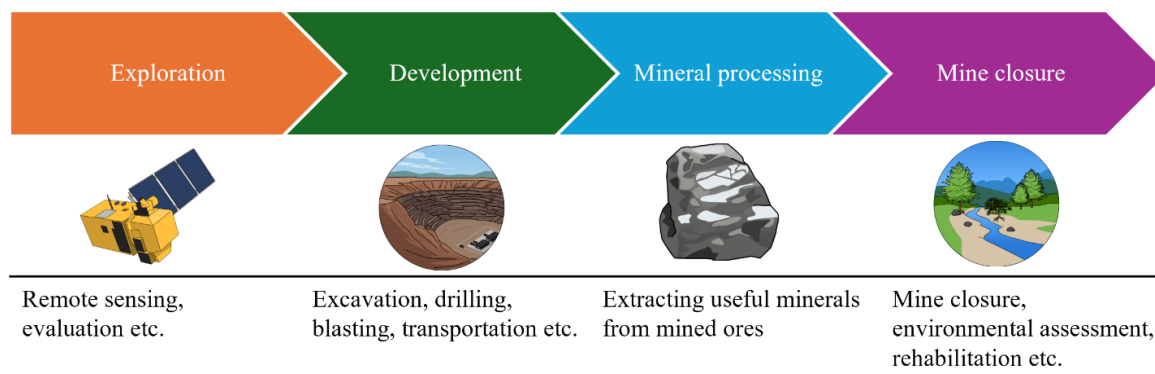


Figure 3 Mine development stages.

1.3.1. 探査

鉱物探査、または単純な探鉱は、社会の資源需要を満たすために使用することができる新しい鉱床を発見するために探索空間を狭めることを目的とした多面的なプロセスである[38], [39]。鉱物探査は、航空写真、衛星画像、地質図、地球物理学的・地球化学的地図など、さまざまな形態の地図データと地理空間データを用いて、一連のステップを経て鉱床を特定するプロセスである[40]。ここ数十年、地質学者は、高解像度のリモートセンシング画像から地質学的情報を抽出することを目的として、ハイパースペクトルデータの定量分析のためのさまざまな技術を開発してきた[41]。ハイパースペクトルセンサーの狭く連続的なスペクトルは、電磁波の吸収特徴を検出することができ、さまざまな鉱物の識別に利用できる。さらに、ハイパースペクトルデータは、鉱床の正確なマッピングや鉱床の品位を推定するための貴重なツールである[42]。

1.3.2. 生産・開発

開発段階には、アクセス道路、処理施設、廃棄物管理システムなど、必要不可欠なインフラの建設が含まれる[43]。さらに、許認可の取得や規制遵守の保証も必要となる。生産段階では、実際に鉱物を採取する。しかし、このプロセスは、掘削、発破、掘削作業を同期させるための高度なスケジューリング・モデルを用いて最適化されることが多い[44]。地盤のハイパースペクトル画像は、地質調査のための新しい技術である。露頭のハイパースペクトル画像を解析することで、垂直に近い崖の断面の鉱物分布と岩相の包括的な調査が容易になる[45]。Boubanga-Tombet (2018) による研究では、熱赤外ハイパースペクトル技術を取り入れたフィールドベースのアプローチにより、垂直崖断面の鉱物学と岩相を効率的にマッピングできることを実証した[46]。

1.3.3. 選鉱

未加工の鉱石は、工業用または商業用の最終製品としては利用できないため、鉱石内の特定の鉱物を抽出する必要がある[47]。これらのプロセスは、mineral processing・ore dressing・beneficiation などと呼ばれる。これらは、貴重な金属鉱物や非金属鉱物を、使用不可能なものから分離する科学技術として定義される[48]。選鉱は湿式・乾式に分類され鉱石中の有用な鉱物品位を高めることによって、その後の製錬コストを低減させるほか鉱物の回収率を高めることを目的としている。

1.3.4. 閉山・リハビリテーション

リハビリテーションとは、ある土地を元の状態にできるだけ近い状態に回復させるプロセスと定義されている[49]。開発後の鉱山が環境に及ぼす影響には、土壌や水域の劣化が含まれる。したがって、鉱区の復旧は、環境への影響を軽減するための重要なステップである[50]。鉱山閉鎖後の周辺環境の保全を確実にするためには、モニタリングの実施が不可欠である。

各フェーズにおける HSI を用いた研究開発の状況を Table 2 に示す。

Table 2 Applications of HSI for mining development.

Author	Mining Phase	Purpose	Year
R. Booysen et al [51].	Exploration	Aircraft-based HS mapping for mineral exploration in areas where access would be limited for various reasons	2019
T. Kurz et al [45].	Exploration	Integrated LiDAR and HS mapping to evaluate widespread near-vertical cliff sections	2012
I. Dumke et al [52].	Exploration	SVM using data acquired by Underwater Hyperspectral Imager to detect and map deeper marine mineral deposits.	2018
Y. Tan et al [53].	Exploration	Band selection (BS) method of hyperspectral imagery was used to improve the accuracy of geologic mapping.	2020
E. M. G. Prado et al [54].	Exploration	Using convolutional neural networks on hyperspectral data to estimate Cu concentrations in drill cores from the Olympic Dam iron oxide copper gold deposit.	2023
R. J. Murphy et al [55].	Exploration	Using Automated Feature Extraction on hyperspectral images to calculate mineral areas in a mine pit.	2017
S. Boubanga-Tombet et al [46].	Development	A field-based approach incorporating thermal infrared hyperspectral technology demonstrated the ability to efficiently map the mineralogy and lithology of vertical cliff cross-sections.	2018
N. Okada et al [56].	Beneficiation	A hyperspectral sensor-based system was proposed to sort the ore before feeding it into the beneficiation process.	2020
C. L. Johnson et al [57].	Beneficiation	Hyperspectral imaging of blasthole and crusher feed samples to optimize gold and copper recovery, grade, and throughput in skarn mineralogy, with predictive model development.	2019
S. Leroy et al [58].	Beneficiation	Machine learning classification of multispectral data from samples for on-line monitoring of particle size distribution and mineralogy of ore slurries.	2019
L. Windrim et al [59].	Beneficiation	Mapping minerals with machine learning integrated with unsupervised and self-supervised learning of hyperspectral images to distinguish between ores and waste on the mine face.	2023
B. Zhang et al [60].	Rehabilitation	The Vegetation Inferiority Index (VII) and the Water Desorption Irrelevance Index (WDI), were used to monitor environmental problems caused by mine development, revealing the vegetation and ecological environment.	2011
J. Levesque et al [61].	Rehabilitation	Unmixing characteristics of hyperspectral data were presented to monitor the rehabilitation status of the tailings dam.	2004
M. Gastauer et al [62].	Rehabilitation	A remote sensing framework to assess the environmental quality during rehabilitation based multispectral Sentinel-2 imagery.	2022

1.4. 本論文の構成

ハイパースペクトルイメージングと機械学習の導入は鉱物種あるいは重金属検出に有効であることは既往研究から明らかであり、鉱山開発の際に生じる環境影響、特に重金属汚染を評価できる可能性がある（第1章）。しかしながら、ハイパースペクトルデータの処理に適した機械学習手法が明らかでない（第2章）。また、機械学習を用いた処理方法が難しい（第3章）。さらに、機械学習を用いた鉱物種の同定方法が確立されていない（第4章）、という課題がある。第2～4章では適した機械学習の選定から、学習モデルの構築、さらにそれらの操作を可能とするアプリケーションの開発を行った。加えて、鉱石中に含有する重金属鉱物品位推定手法は明らかでない（第5章）。また、それらのリモートセンシングへの拡張方法が確立されていない（第6章）。従って第5,6章では機械学習ベースの重金属鉱物品位推定手法を確立するとともに、高高度から撮影されたデータ群に適用するためのプロトコルを提案した。本論文の概要を Figure 4 にまとめた。本研究を通じて、ハイパースペクトルイメージングと機械学習を組み合わせによる鉱物同定及び重金属汚染の検出手法を提案した。本提案技術は環境調和型鉱山操業を推進するための有力なツールとなり、モニタリングシステムとして鉱害問題の発生の抑止力となることが期待される（第7章）。

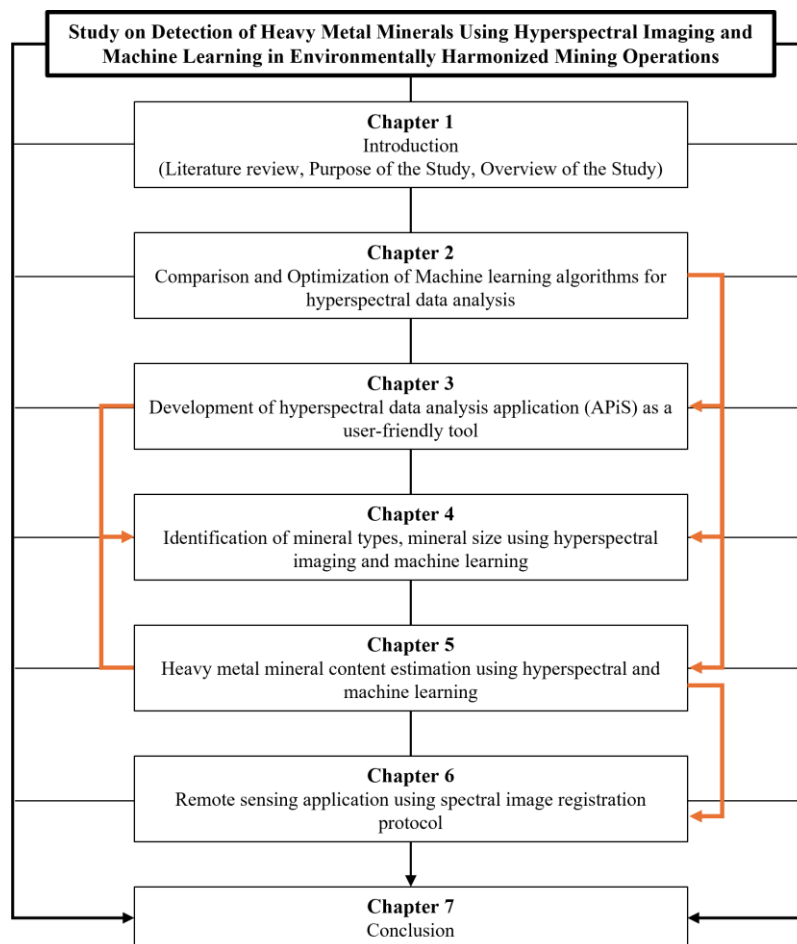


Figure 4 Overview of the study.

2. 機械学習アルゴリズムの比較と最適化

2.1. 本章の背景

ハイパースペクトル画像は高い識別性能を持つことが実証されており、現在、資源探査や鉱物鑑定など、資源開発の分野で多くのアプリケーションに採用されている。しかし、そのデータ構造は複雑であり、データ処理・解析には機械学習が不可欠である。畳み込みニューラルネットワーク（CNN）をはじめとする最先端の機械学習技術が数多く開発されているが、従来の機械学習手法と比較した総合的な性能評価はまだ行われていない。本章では、10種類の機械学習モデル（CNN、ツリー、判別、ロジスティック回帰、ナイーブベイズ、サポートベクターマシン、KNN、アンサンブル、（浅い）ニューラルネットワーク、カーネル近似）を、ベンチマークとしてよく用いられる4つの主要なハイパースペクトルデータセット（Indian Pines、Salinas、Pavia University、Botswana）に適用し、その分類性能を比較した。

2.1.1. データセット

このセクションでは、本研究で使ったデータセットについて説明する。これらのデータセットは、機械学習モデルの性能を評価するためのベンチマークとして頻繁に採用されている。モデルの公正な比較を確実にするため、これらのデータセットに対して、ノイズや次元削減を含む前処理は行わなかった。データは以下のソースから入手した：

(https://www.ehu.eus/ccwintco/index.php/Hyperspectral_Remote_Sensing_Scenes : 2024年9月15日アクセス)。Figure 6は各データセットのスペクトルプロットを示し、Figure 7は各クラスのデータセットの総数を示す。

HSIのデータ構造は次式で示され、ピクセルに格納された特定の x - y 座標と波長 λ における反射強度を示している。

$$I = R(x, y, \lambda)$$

ここで、 S と指定されたスペクトルデータは、次式に示されるように、 n 波長におけるHSIの指定座標 (xy) で画素に格納される。

$$S_{x,y} = (R(x, y, \lambda_1), R(x, y, \lambda_2), \dots, R(x, y, \lambda_n))$$

したがって、 i 画素 HSI のデータ構造は次式で与えられる：

$$R = (S_{1,1}, S_{1,2}, \dots, S_{i,j})$$

2.1.2. ハイパースペクトルデータの処理方法

1次元（1D）スペクトルデータを機械学習モデルで処理するために、3次元（3D）データキューブをTable 3に示す擬似コードに従って前処理し、Figure 5に示すように、各行のスペクトルからなる表に展開した。このデータセットは、モデルの交差検証のために分割され、各クラスの10%がテストデータとして指定された。

Table 3 Pseudocode for hyperspectral data processing.

Algorithm 1: Algorithm to Construct Table data

*Input 1: **dataFile** - path to the hyperspectral data file (e.g., 'Indian_pines_corrected.mat')*

*Input 2: **groundTruthFile** - path to the ground truth file (e.g., 'Indian_pines_gt.mat')*

*Output: **finalData** - concatenated data matrix with hyperspectral data and ground truth labels*

- 1 *Load the hyperspectral data from **dataFile**.*
 - 2 *Load the ground truth data from **groundTruthFile**.*
 - 3 *Extract hyperspectral data from the data structure*
 - 4 *Extract ground truth data from the ground truth structure.*
 - 5 *Get the dimensions of the hyperspectral data (**row**, **col**, **band**).*
 - 6 *Reshape the hyperspectral data into a 2D array where each row is a pixel and each **col** is a **band**.*
 - 7 *Reshape the ground truth data into a column vector.*
 - 8 *Concatenate the reshaped hyperspectral data and the reshaped ground truth data into **finalData**.*
-

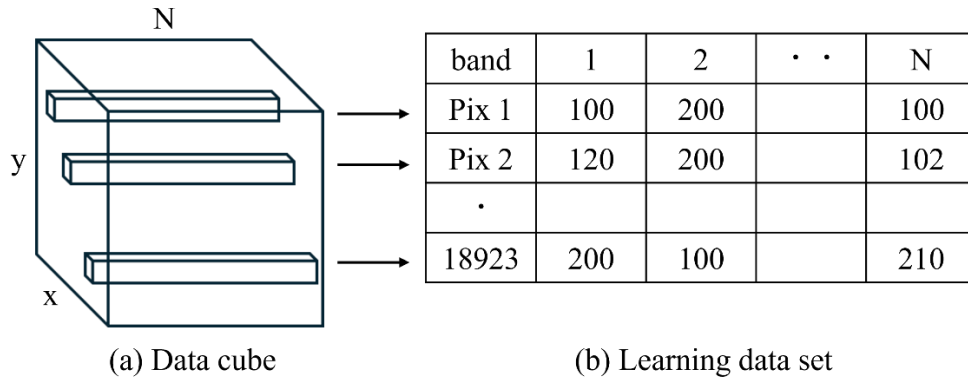


Figure 5 Schematic of data cube and table data.

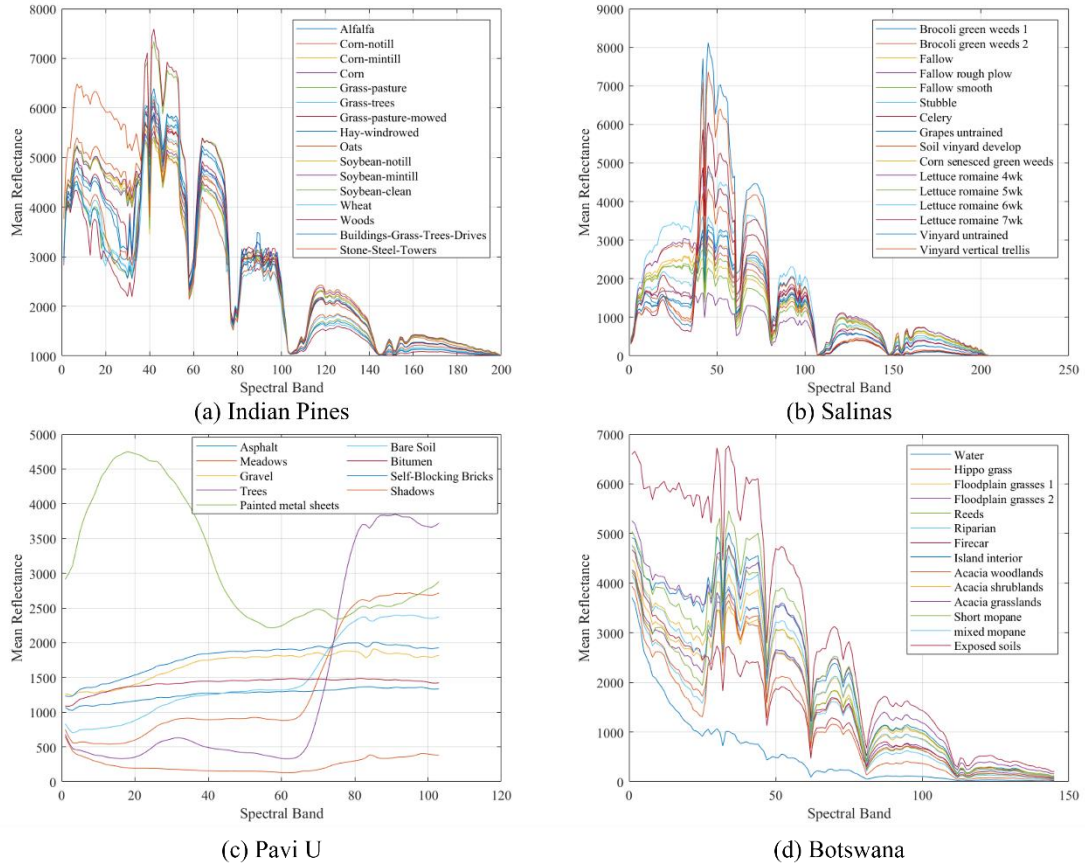


Figure 6 Spectral plots of (a) Indian Pines, (b) Salinas, (c) Pavia U, and (d) Botswana.

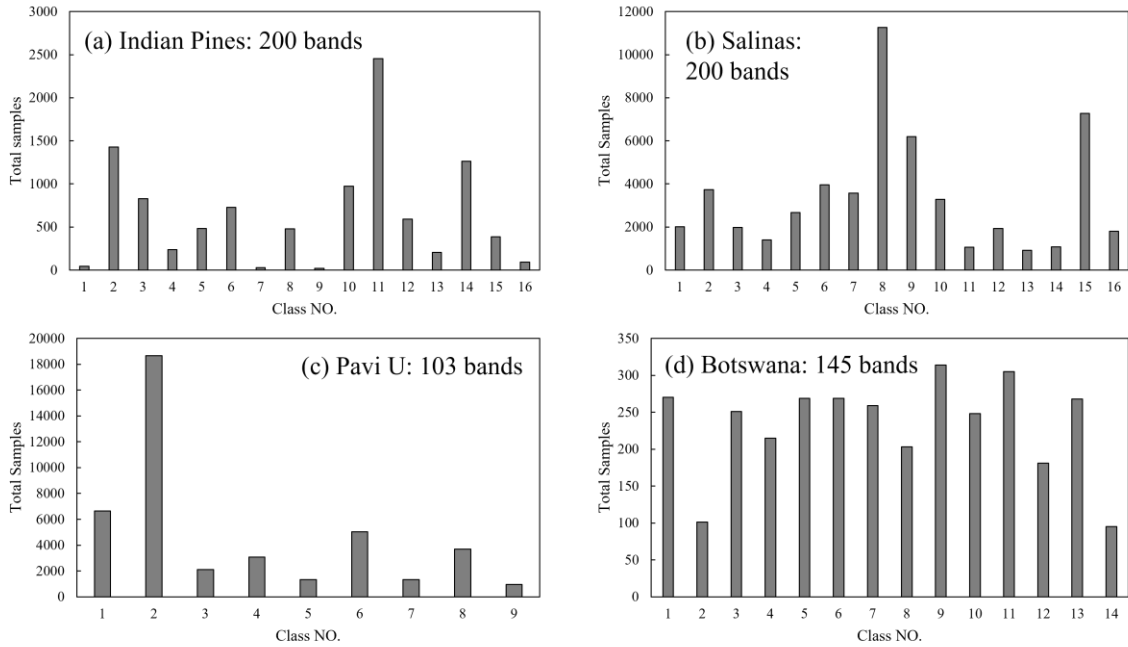


Figure 7 Number of datasets for each class.

2.1.3. Indian Pines

インディアナ州北西部にあるインディアン・パインズのテストサイト上空で AVIRIS センサーによって撮影されたシーンは、145×145 ピクセル、400～2500nm の 224 の分光反射率バンドで構成されている。グラントゥルースは 16 のクラスに分けられたが、それらは相互に排他的ではなかった。バンド数は、水の吸収に関連するバンド（[104-108]、[150-163]、および 220）を削除することで、200 バンドに削減された。

2.1.4. Salinas (Salinas scene corrected)

サリナスバレー（Salinas Valley）上空で AVIRIS センサーによって撮影された画像は、512×217 ピクセル、400～2500 nm の 224 スペクトル反射率バンドで構成されている。画像はセンサーの放射輝度データとしてのみ利用可能であったが、グラントゥルースは 16 のクラスに分けられた。バンド数は、水分吸収に関連するバンド（[108-112]、[154-167]、および 224）を除去することで 200 バンドに削減された。

2.1.5. Pavia University

この画像は、610×610 ピクセル、430～860 nm の 103 の分光反射率バンドで構成されている。グラントゥルースは 9 つのクラスに分けられたが、画像内の一部のサンプルは情報が不足していたため、解析から除外せざるを得なかった。

2.1.6. Botswana

このシーンは 2001 年から 2004 年にかけてボツワナのオカバンゴ・デルタ上空で NASA EO-1 によって取得されたもので、1496×256 ピクセル、400～2500nm の 242 の分光反射率バンドで構成されている。グラントゥルースデータは 14 のクラスに分けられた。校正されていないバンドやノイズの多いバンド、特に水分吸収の特徴に関連するバンドは除去され、残りの 145 バンド（[10-55, 82-97, 102-119, 134-164, 187-220]）が特徴候補として使用された。

2.1.7. 精度

精度は、モデルの予測性能の評価を定量化する。これは、すべての予測結果のデータポイントの数を、正しく分類されたデータポイントの数で割ることによって示される。したがって、精度は次式で表される[63]。

$$Accuracy = \frac{TP + TN}{TP + TN + FP + FN}$$

上式において、真陽性(TP)は陽性クラスに属すると正しく分類されたデータポイントの数を表し、真陰性(TN)は陰性クラスに属すると正しく分類されたデータポイントの数を表す。偽陰性(FN)は陰性と誤って分類されたデータポイントの数を表し、偽陽性(FP)は陽性と誤って分類されたデータポイントの数を表す。精度値が高いほど、モデルの予測性能が向上していることを示す。

混同行列も精度を評価するための重要なツールである。混同行列は Figure 8 に表形式で示されている。行列は以下のカテゴリでラベル付けされている： 真陽性(TP)、真陰性(TN)、偽陽性(FP)、偽陰性(FN)[64]。混同行列によって表示することによって、専門家でなくとも機械学習モデルのパフォーマンスを容易に理解できる[65]。

	Predicted class	
Actual class	TP True Positives	FN False Negatives
	FP False Positives	TN True Negatives

Figure 8 Confusion matrix.

2.1.8. 機械学習アルゴリズム

Figure 9 に示すように、機械学習は、教師あり学習、教師なし学習、強化学習の 3 つの主要なタイプに分類することができる[66]。教師あり学習では、人工知能が学習に使用する正解ラベルを含む学習データが提供される。対照的に、教師なし学習では、クラスタリングを実行する目的で、正解のない学習データの分析が行われる[67]。強化学習は、意思決定エージェントと周囲の環境との相互作用から得られる報酬の変化を通じて学習するプロセスと定義される。言い換えれば、試行錯誤を通じてパフォーマンスを向上させる学習方法である[68]。教師あり学習は、分類と回帰という 2 つの異なるカテゴリに分類することができる。教師あり学習では、分類とは、入力に基づいてデータをあらかじめ定義されたクラスに分類するプロセスを指す[69]。対照的に、回帰分析は入力変数のセットに基づいて将来の結果を予測する[70]。

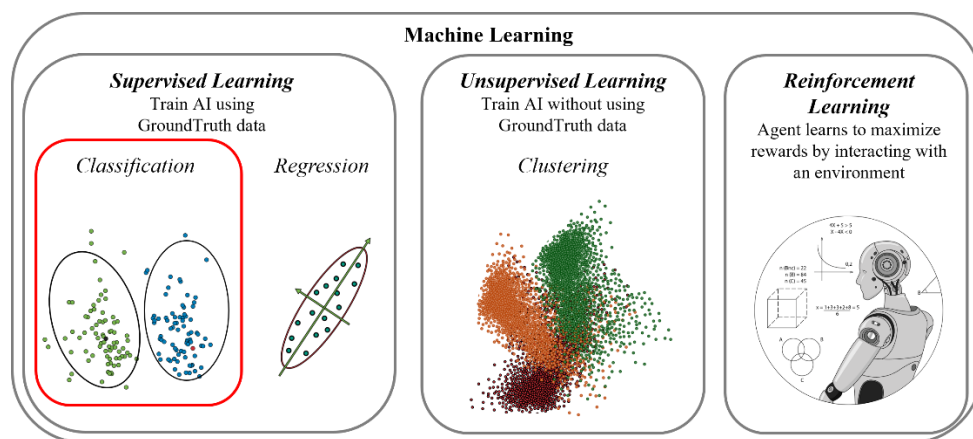


Figure 9 Categories of machine learning.

本研究では、教師あり学習に基づく分類タスクを実施した。本研究で利用した機械学習モデルは、カスタムの畳み込みニューラルネットワーク（CNN）モデルを用いて学習され、残りのモデルは MATLAB Classification Learner アプリケーションを用いて学習された。データ間の差異を避けるため、ハイパーパラメータはデフォルト値に設定され、主成分分析（PCA）のような前処理は行われなかった。Figure 10 に示す機械学習モデルが、学習と分類に採用された。

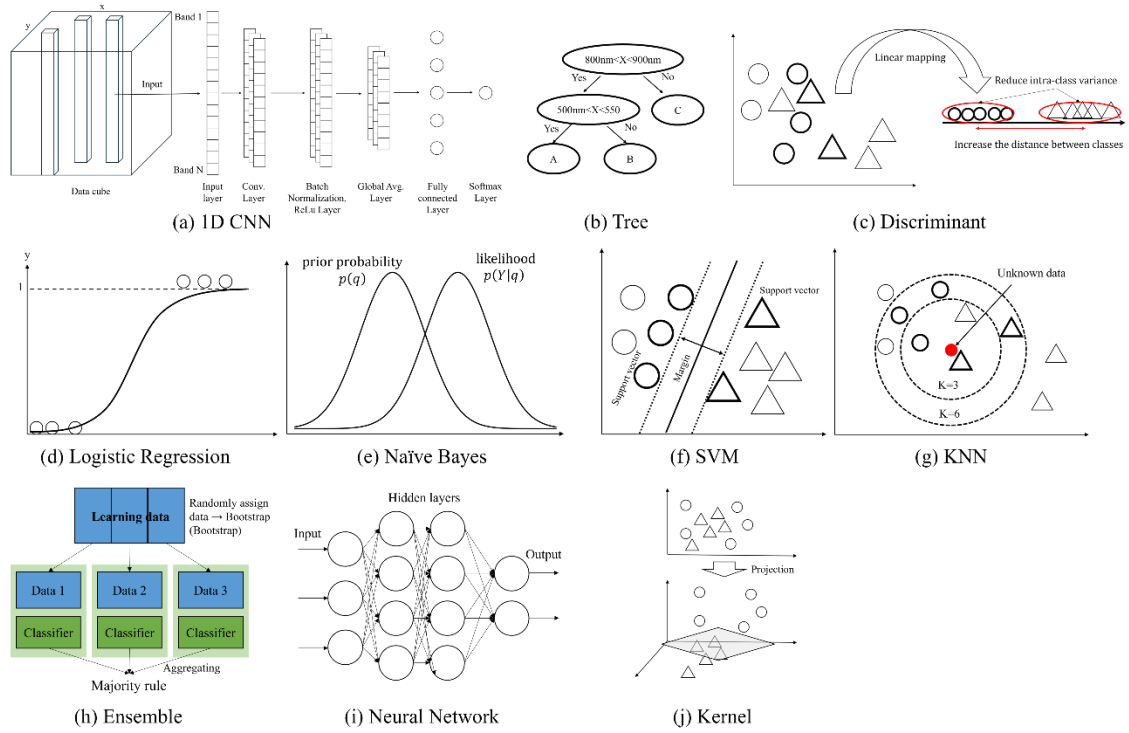


Figure 10 Schematic diagrams of machine learning models.

2.2. 結果と考察

Table 4 は、与えられたデータセットに対して各機械学習モデルが達成した精度を示している。分類結果を Figure 11、Figure 12、Figure 13、Figure 14 に示す。データはグラウンドトゥルースの状態が表示され、各機械学習モデルの結果が表示されている。両者の乖離が小さいことは、モデルの性能が高いことを示している。その結果、Salinas、Pavia University、Botswana のデータセットでは、ワイド・ニューラルネットワークが最も高い分類性能を示した。平均分類性能は 95.71%であり、これは全てのモデルの中で最も高い精度であった。Cubic SVM は、Indian Pines で最高の分類性能を示し、ロジスティック回帰は、すべてのデータ集合で最低の分類性能を示した。ロジスティック回帰はすべてのデータセットで最も低い分類性能を示したが、1D-CNN は平均 75.56%の分類性能で 7 番目に良いモデル性能を示した。Indian Pines データセットを用いて得られた機械学習の結果は、最も精度が低いことがわかった。

Table 4 Results of the machine learning test.

Model Type	Preset	Testing Accuracy (%)			
		Indian Pines	Salinas	Pavia University	Botswana
CNN	1D-CNN	53.516	82.705	85.480	80.556
Tree	Fine Tree	67.285	87.990	85.200	89.506
Discriminant	Linear Discriminant	77.832	91.540	84.896	95.062
Efficient Logistic Regression	Logistic Regression	30.273	72.880	69.675	41.049
Naïve Bayes	Kernel Naïve Bayes	54.590	82.100	68.225	79.321
SVM	Cubic SVM	92.188	96.670	96.049	96.605
KNN	Weighted KNN	77.734	92.440	89.525	93.827
Ensemble	Bagged Trees	87.207	96.640	92.869	92.901
Neural Network	Wide Neural Network	91.797	96.420	96.493	98.148
Kernel	SVM Kernel	84.375	93.920	94.739	94.444

2.2.1. CNN

CNN は高い分類性能を示すことが知られている。しかし、本研究で用いたデータセットでは分類精度は他の機械学習手法に劣っていた (Indian Pines: 53.516%, Salinas: 82.705%, Pavia University: 85.480%, Botswana: 80.556%)。この現象にはいくつかの可能性がある。そのひとつは、CNN の学習には相当量の学習データが必要であるが、今回はそれが十分な量入手できなかったことである。場合によっては、データポイントの数が不十分で、数十例しか利用できなかったこともあり、これが学習プロセスに支障をきたした可能性がある。データ不足が過学習を招き、汎化性能が損なわれた可能性がある。最も低い精度を示した Indian Pines データセットは、クラスごとのデータポイント数が大きく異なるなど、データの偏りが顕著であった可能性がある。これが CNN の効果的な学習能力を妨げた可能性がある。逆に、このモデルは比較的高い分類効果を示し、Salinas と Pavia University のデータセットでは約 80% の性能レベルを達成した。適切なハイパーパラメータの選択は、畳み込みニューラルネットワーク (CNN) の学習精度に大きな影響を与える。したがって、適切なハイパーパラメータを設定することにより、CNN の学習精度を向上させることが可能であると考えられる。

2.2.2. 決定木

決定木 (Tree) は比較的単純なモデルであるが、特に Salinas、Pavia University、Botswana のデータセットで高い精度を示した。これは、クラス識別が簡単で、これらのデータセットの複雑性 (冗長性、空間

的・スペクトルの変動性)が比較的低いことを示している。逆に、Indian Pines の精度が低いのは、データセットの複雑さとモデルアーキテクチャが、このデータセットに最適でない可能性を示している。樹木モデルはデータの局所的な特徴を捉えるには適しているが、Indian Pines のような高次元でスペクトル的に複雑なデータセットに対して正確なクラス識別を達成するのは困難である。これは、このようなデータセットに特有の相関性の高いスペクトル情報や空間パターンを、決定木モデルが効果的に捉えることができないためであると考えられる。

2.2.3. 線形判別分析

本手法は全体的に有効であり、Botswana データセットにおいて顕著に高い分類精度を示した。この手法は、データセットが直線的に分離された場合にも安定した性能を示した。Botswana のデータセットでは、データ点とバンドの数が最も少なく、アーキテクチャ設計がデータセットに最適であることが示された。

2.2.4. ロジスティック回帰

その結果、この手法はすべてのモデルの中で最も低い分類性能を示した。特に、Indian Pines と Botswana のデータセットにおいて、このモデルは低い精度を示し、これはアーキテクチャ設計がこれらのデータセットの特性に最適に整合していないことを示している。線形モデルがクラスの不均衡の影響を受けやすいことは、もっともなことである。しかし、Indian Pines と同じ 200 バンドを持つ Salinas で精度が 70%を超えていることは注目に値する。これは、データセットに内在する不均衡がモデルの精度に影響を与えた可能性を示唆している。このデータセットの不一致がモデルの精度に影響を与えた可能性がある。

2.2.5. ナイーブベイズ

本モデルは、特に Salinas と Botswana のデータセットにおいて、比較的高い精度を示した。このことは、モデルが問題のデータセットに適切に適合していることを示している。

2.2.6. SVM

このモデルは、特に HSI データのような高次元データセットの分類において、卓越した性能を発揮することで有名である。このモデルは、すべてのデータセットで 90%を超える高い分類精度を示し、多様なデータタイプに有効であることを示している。

2.2.7. KNN

KNN はその比較的単純なアーキテクチャにもかかわらず、特に Salinas と Botswana のデータセットにおいて 90%を超える精度を達成するなど、全体的に良好な結果を示している。この単純な設計は、結果の解釈が容易で、計算コストが比較的低いという利点がある。

2.2.8. アンサンブル学習

このモデルは全体的に優れた性能を示し、安定性と汎化能力を示す。複数の弱い学習モデルの配置は、モデルがノイズの多いデータに強く、過学習を防ぐことを示している。

2.2.9. (浅い) ニューラルネットワーク

このモデルは、多様なデータセットにわたって顕著な精度を示し、膨大な種類のデータに対して一貫した性能を発揮することが示唆された。高い性能はデータセットの複雑さや偏りに依存せず、CNN と比較して比較的低い計算コストという利点を提供する。さらに、このモデルの複雑さと解釈可能性は最小限であるため、透明性と信頼性が向上する。

結果から、サポートベクターマシン（SVM）は Indian Pines データセットで最高の性能を示したが、ニューラルネットワークは他のデータセットで最高の性能を示した。対照的に、CNN はこれらのデータセットにおいて中程度の性能を示した。これらの結果は、データセットの特定の特徴に基づいて適切な機械学習モデルを選択する必要性を示唆している。一般に、CNN のような新しい機械学習モデルは、計算コストが高く、解釈可能性の点で課題がある傾向がある。本研究は、古典的な機械学習モデルが、場合によっては最先端のモデルを凌駕する可能性があることを実証し、特定の条件下で優れた性能を達成する伝統的アプローチの可能性を強調した。

2.2.10. カーネル近似

全体的な精度は高く、Indian Pines 以外のデータセットでも 90% の分類性能を示しており、Indian Pines のようにクラスのデータ数が偏っているデータセットには適していないことが示唆される。

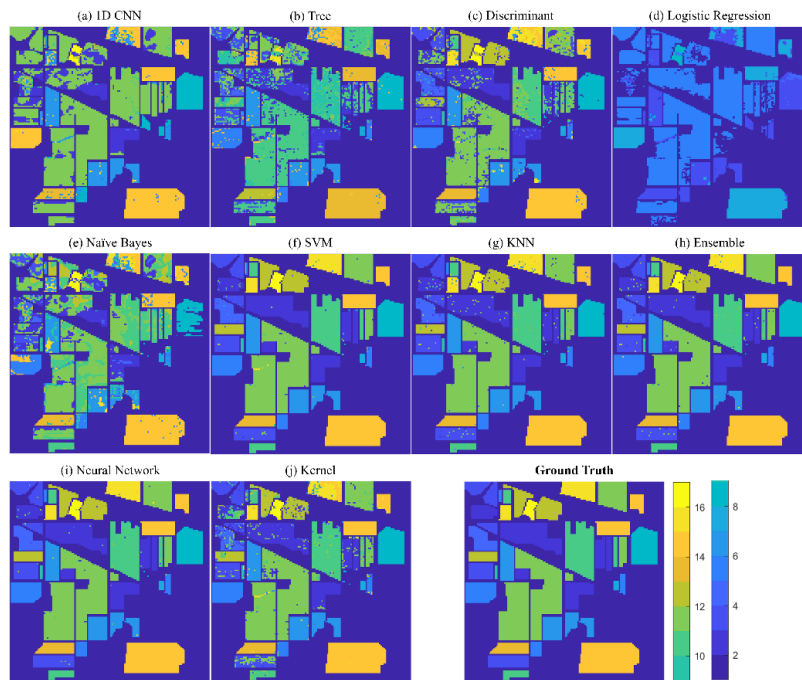


Figure 11 Indian pines segmentation results.

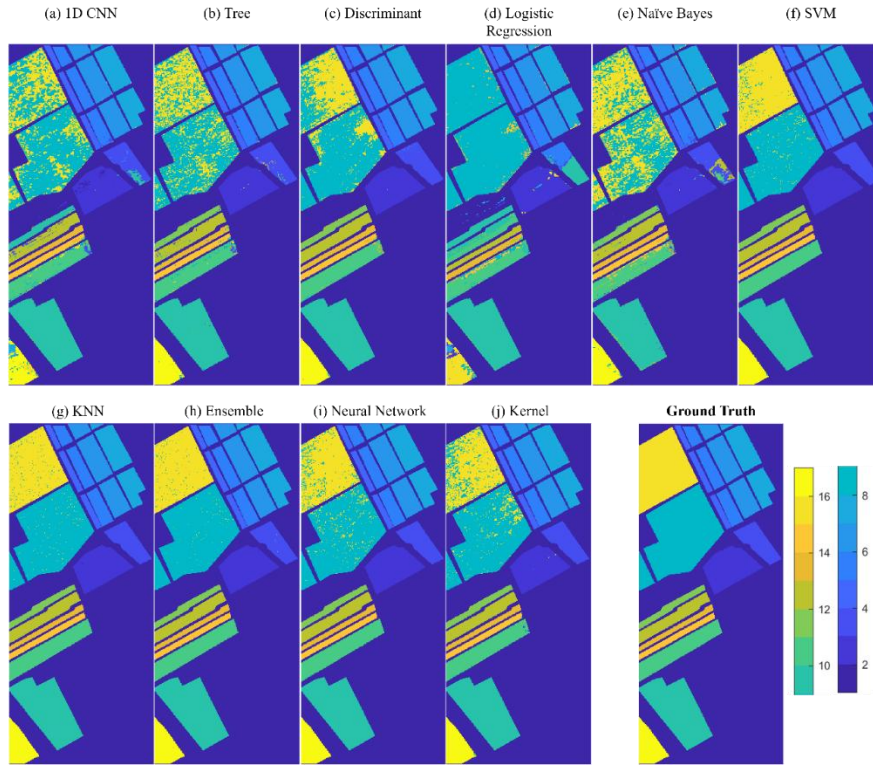


Figure 12 Salinas segmentation results.

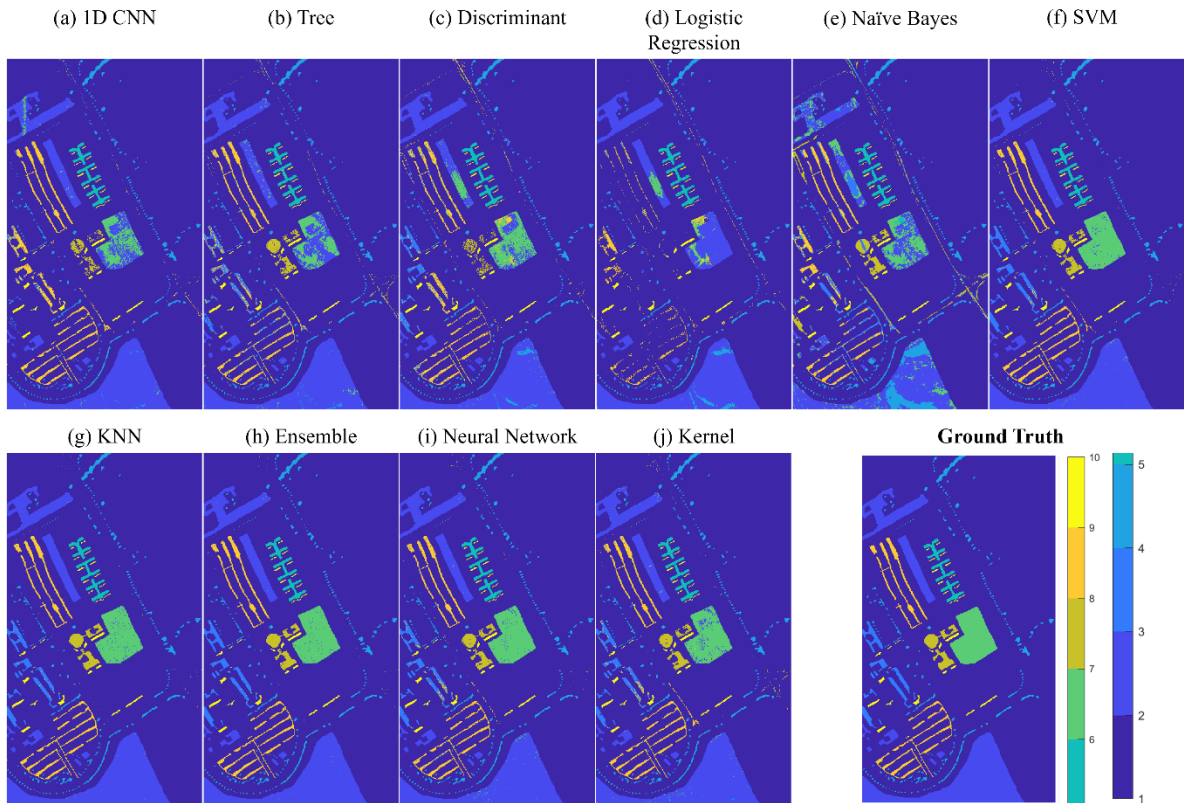


Figure 13 Pavia university segmentation results.

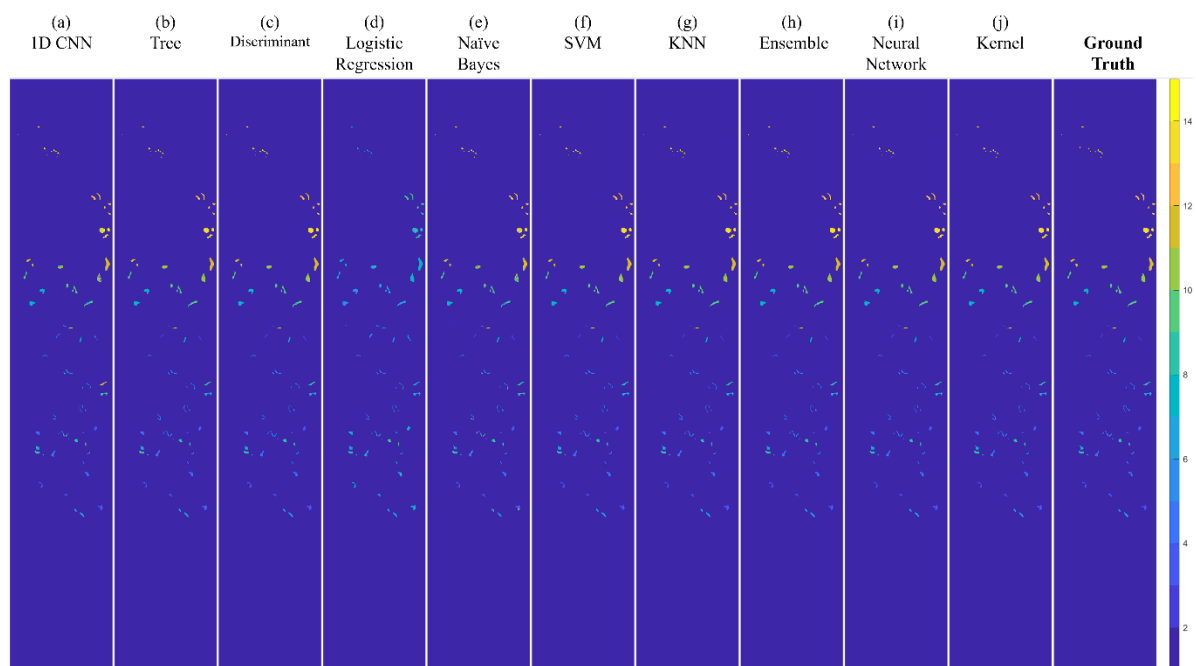


Figure 14 Botswana segmentation results.

2.3. 最適な機械学習モデルに関する結論

本章の目的は、ハイパースペクトルデータの解析における機械学習アルゴリズムの適合性を検討することである。近年、ハイパースペクトルデータ解析に対する多くのアプローチ、特に畳み込みニューラルネットワーク（CNN）が提案されている。しかし、確立された古典的な機械学習手法との直接的な比較がないため、これらの手法の相対的な利点と欠点は不明確なままである。本研究では、特性の異なる4つの異なるハイパースペクトルデータセットについて、10種類の機械学習モデル（CNN、ツリー、判別、ロジスティック回帰、ナイーブベイズ、サポートベクターマシン、KNN、アンサンブル、（浅い）ニューラルネットワーク、カーネル近似）の性能を評価した。その結果、浅いニューラルネットワークはすべてのデータセットで優れた分類精度を示したが、畳み込みニューラルネットワークは中程度の性能しか示さなかった。さらに、SVMもアンサンブル学習も、CNNに比べて優れた分類性能を示した。残りのモデルの分類結果は、各モデルの適用可能性が問題のデータセットに依存していることを示した。これらの結果は、機械学習アルゴリズムがデータを効果的に処理できること、そして適切な学習モデルの選択はデータセットの特定の特徴に基づくべきであることを示している。CNNモデルは、その卓越した識別性能で有名である。しかし、CNNモデルは、計算負荷が大きく、説明可能性に限界がある。CNNモデルの計算負荷とアーキテクチャの単純さは、対象となるデータセットの特定の特性に合わせることができると判断された。

3. ハイパースペクトルデータ解析アプリの開発

3.1. 本章の背景

ハイパースペクトルデータは、数百のスペクトル波長を含み、鉱物特有な反射スペクトルを示すことから、鉱物識別処理にとって強力なツールである。機械学習はハイパースペクトルデータから鉱物種を特定することができるが、その高い次元性は一般ユーザにとって課題となる。先行研究としてハイパースペクトルデータと機械学習処理を高度に統合した対話型 MATLAB ベースの解析スクリプトを開発した [88]。このスクリプトは、従来は専門家しか利用できなかったハイパースペクトルデータ処理を、幾何冶金学の分野で、従来よりもはるかに広範なユーザが利用できるようにした点で革新的であった。しかしながら、グラフィカル・ユーザー・インターフェース (GUI) や機能拡張のしやすさという点では改善の余地があった。また、スクリプトベースのソフトウェアは、コマンドライン操作が中心であるため、プログラミングの知識が必要であった。特に、スクリプトの実行やパラメータの設定は手作業で行われるため、操作が煩雑であった。加えて、データの可視化には対応しておらず、ユーザ側で別途処理を行う必要があった。さらに、処理機能の切り替えには、新たにスクリプトを実行する必要があり、モジュール間の遷移が明確でなかった。

本章では、ユーザビリティをさらに向上させ、恩恵を受けられるユーザの幅を広げた、APiS (AI Powered intelligence Spectrum analyzer) と名付けた新しいアプリケーションを紹介する。使いやすさ、効率性、機能性を大幅に改善した。これは MATLAB スクリプトをアプリケーションに変換することで実現した。さらに、スペクトルや擬似 RGB 画像の表示など、新たな機能が追加・強化されている。このアプリケーションはユーザフレンドリに設計されており、プログラミングのスキルを必要としない。MATLAB と緊密に統合されているため、新しいユーザ固有の分析を組み込むことができる。

3.2. APiS の概要

AI Powered intelligence Spectrum analyzer (APiS) は、最小限のユーザ入力でハイパースペクトルデータを解析するよう設計されており、コーディングの必要はない。ユーザインターフェースは、(1)可視化、(2)学習、(3)セグメンテーション、(4)テストの 4 つのモジュールで構成されている。これらのモジュールは、それぞれ直感的な操作に対応している。Figure 15 に示すように、解析プロセスは従来の機械学習のワークフローに沿って構成されている。この機能により、ユーザは一貫したワークフローに従ってハイパースペクトルデータの可視化、学習データの構築、機械学習モデルの選択、モデルの学習、性能評価を行うことができる。これにより、ユーザビリティとユーザエクスペリエンスが大幅に向上する。特に機械学習との統合に重点を置いており、これによりユーザは分類や回帰タスクを実行することができる。さらに、分類には最先端の畳み込みニューラルネットワーク (CNN) モデルを含む 34 の機械学習モデルを、回帰には CNN を含む 27 の機械学習モデルを採用している。これにより、ユーザのニーズに合わせた分析が容易に行える。

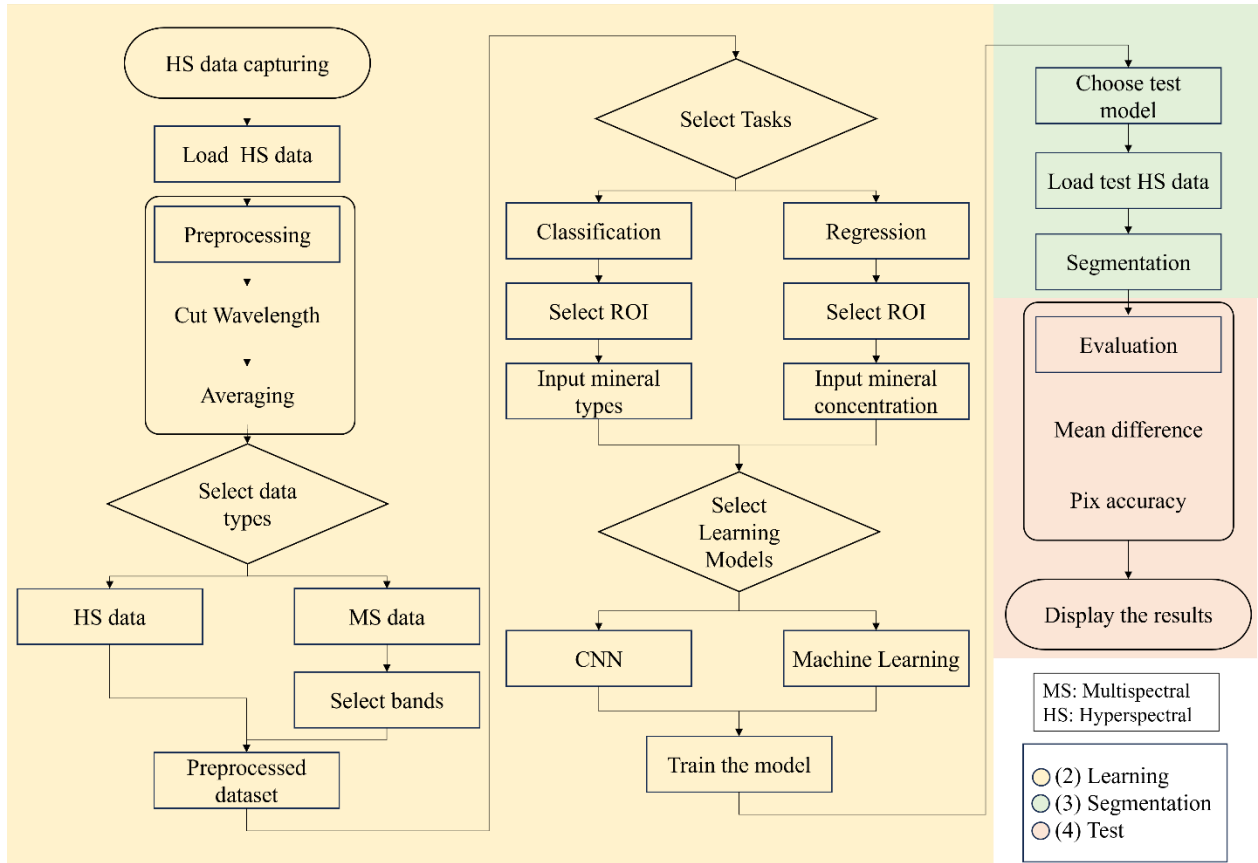


Figure 15 Overview of APiS.

3.3. 既往研究

ハイパースペクトルデータは、MATLAB や Python などのプログラミング言語だけでなく、市販のソフトウェアを使用して解析することもできる。MATLAB には Image Processing Toolbox™ Hyperspectral Imaging Library があり、ハイパースペクトル画像の処理と可視化のための関数とツールが提供されている[96], [97]。Python では、ハイパースペクトルデータを処理するための Python モジュール Spectral Python (Spy) が提供されており、ハイパースペクトルデータを処理するための多くの関数も備えている。商用ソフトウェアとしては、ENVI (Environment for Visualizing Images, Inc.) が広く使用されているツールの一つである。しかしながら、MATLAB や Python で提供されるツールを効果的に利用するには、プログラミング言語の高度な理解が不可欠である[98]。ENVI のような市販のソフトウェアであっても、大規模なデータセットの処理に使用する場合は手間がかかる。HSI-PP や HYPER-Tools など、ハイパースペクトルデータ解析のためのツールが数多く提案されている[99], [100]。これらのツールは高度でユーザフレンドリなハイパースペクトルデータ処理機能を提供する一方で、近年急速に成長している深層学習モデルとの統合はまだ行われていない。

本章では、高度なプログラミング技術が必要としないユーザフレンドリなハイパースペクトルデータ解析アプリケーションを提案する。このアプリケーションはハイパースペクトルデータと機械学習を統合した設計となっており、データの可視化だけでなく、学習データの構築、学習、学習モデルの評価も可能である。このアプリケーションは、これまでプログラミングの専門知識を持つ一部の専門家に限られていたハイパースペクトルデータ解析技術へのアクセスを容易にする。

3.4. 方法

3.4.1. 開発環境

このプロジェクトの主な開発環境は MATLAB (R2023a) である。このプロジェクトでは、Computer Vision Toolbox を採用した。使用したツールボックスは、Computer Vision Toolbox : バージョン 10.4 (R2023a)、Deep Learning Toolbox : Version 14.6 (R2023a)、Image Processing Toolbox : Version 11.7 (R2023a)、Parallel Computing Toolbox : バージョン 7.8 (R2023a)、Signal Processing Toolbox : Version 9.2 (R2023a)、Statistics and Machine Learning Toolbox Version 12.5 (R2023a)を使用した。アプリケーションの構築には、Figure 16 に示す MATLAB App Designer を使用した。オペレーティングシステムは Microsoft Windows 11 Home Version 10.0 を使用した。MATLAB で開発された対話型機械学習アプリは、何十種類もの機械学習モデルを組み込んでおり、他のプログラミング環境よりもはるかに使いやすことが分かっている。提案するアプリは、MATLAB 環境を使用して、それらとの強力な統合を実現する。

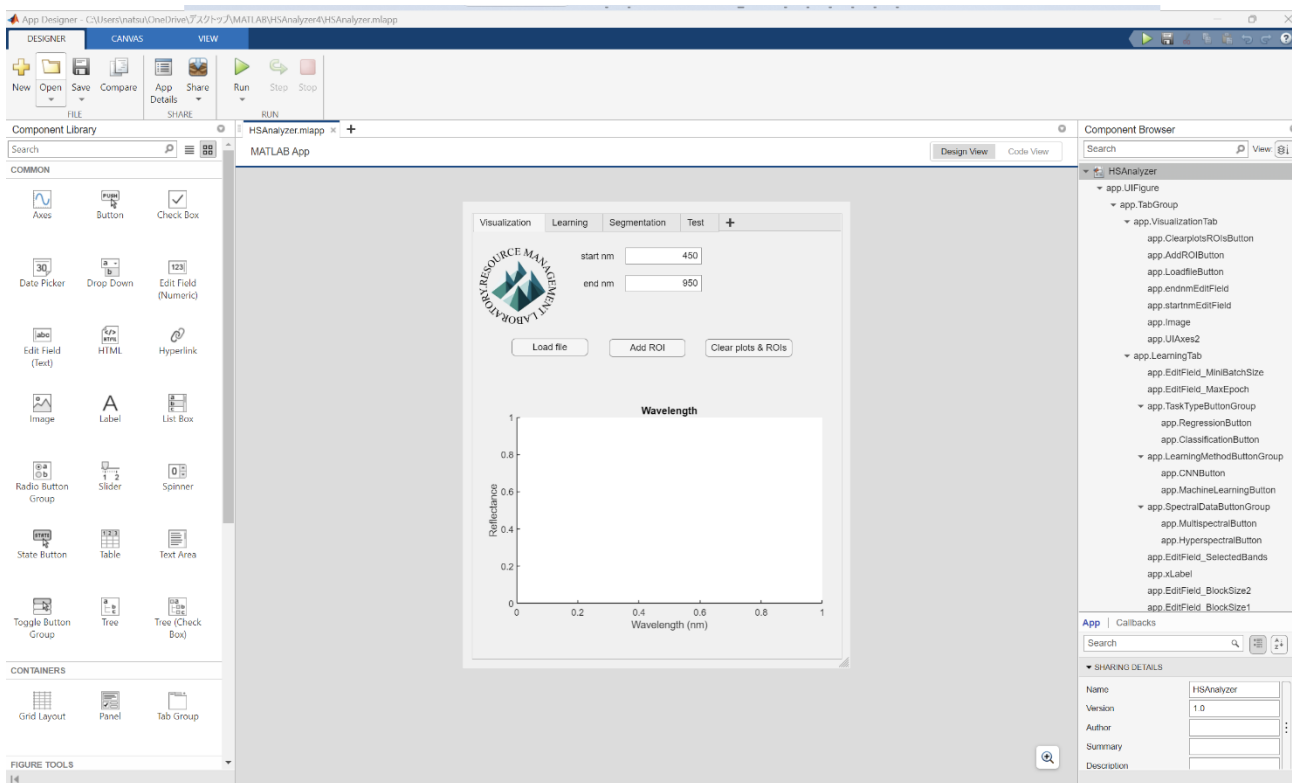


Figure 16 Overview of MATLAB App Designer.

3.4.2. UI / UX デザイン

APiS システムは、ユーザフレンドリな操作を重視しており、すべてのユーザインターフェースコンポーネントは解析フローに沿って配置されている。各システムモジュールは、タブを切り替えることでアクセスでき、Figure 17 に示す。

(1) 可視化 : このモジュールはハイパースペクトルデータの平均スペクトルを表示する。ユーザは表示する関心領域 (ROI) と希望の波長幅を選択することができる。このタブの概要を Figure 17 (a) に示す。

(2) 学習： このモジュールでは、ROI によって学習データとして使用するハイパースペクトルデータ・使用する波長領域・平均化フィルタのブロックサイズ・ハイパースペクトルデータまたはマルチスペクトルデータの分析・機械学習方法・分類または回帰タスクを選択する。マルチスペクトルデータの場合、ユーザは任意の数のバンドを入力し、指定したバンドのみを使用して分析を実行することができる。機械学習に畳み込みニューラルネットワーク（CNN）を選択した場合、エポック数とミニバッチ数を入力することができる。このタブの概要を Figure 17(b)に示す。

(3) セグメンテーション： この前のモジュールでは、学習データの設定と学習パラメータの値が入力される。セグメンテーションモジュールでは、それらの値を用いて機械学習が実行される。機械学習プロセスは、MATLAB Classification Learner アプリまたは Regression Learner アプリと緊密に統合されている。機械学習プロセスが完了すると、テスト・ハイパースペクトルデータのセグメンテーションが実行される。このタブの概要を Figure 17 (c) に示す。

(4) テスト： このモジュールでは、モジュール(3)でセグメンテーションされたテスト画像がグランドトゥールース画像 を用いて評価され、平均差とピクセル精度が計算される。このタブの概要を Figure 17(d)に示す。

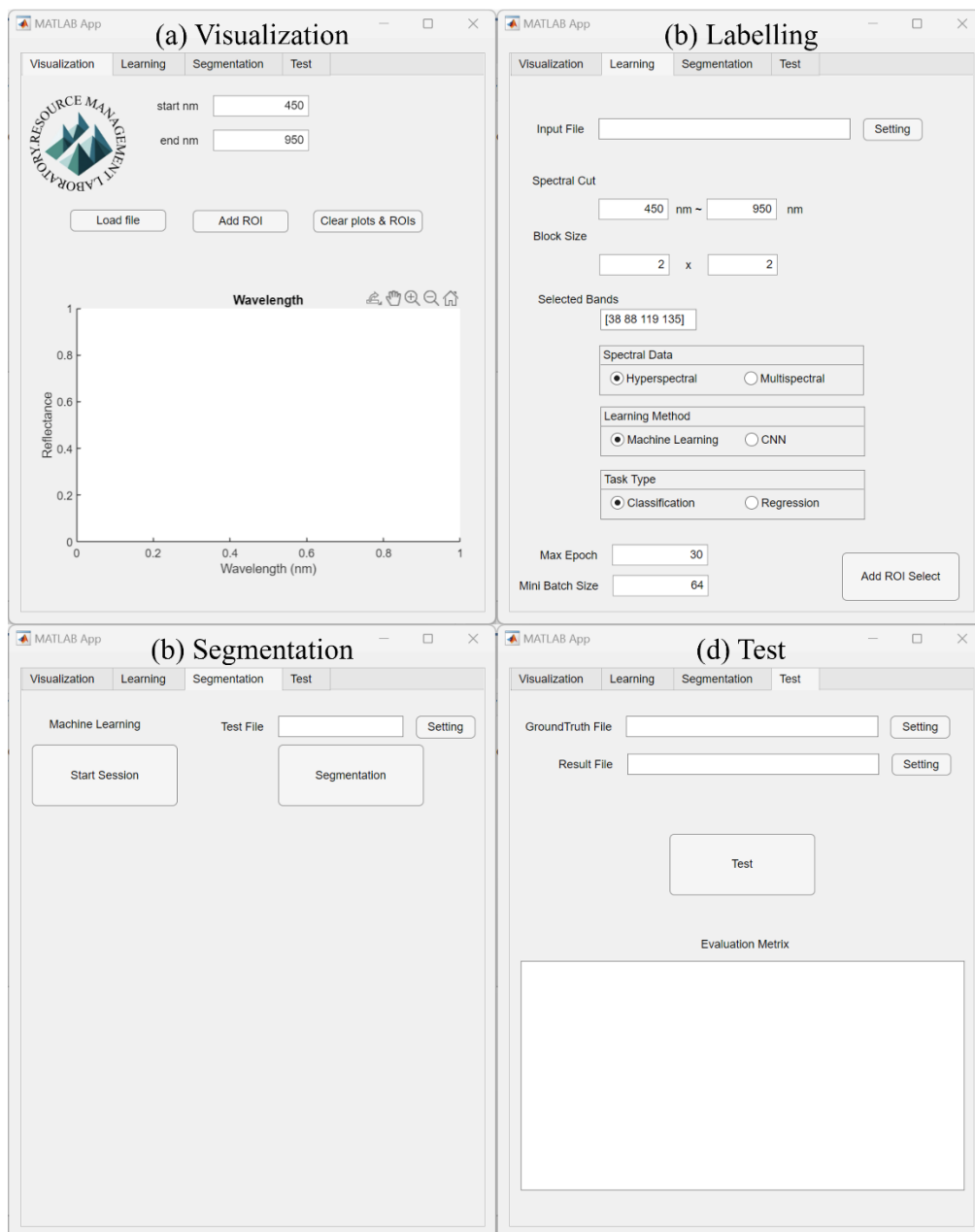


Figure 17 Overview of APiS app.

3.4.3. アルゴリズムの実装

APiSにおいて、ハイパースペクトルデータ解析は、1次元のハイパースペクトル波長データに対して行われる。関心領域（ROI）を選択することで、ハイパースペクトルデータ内の任意の位置が抽出され、平均化され、Figure 18 に示すようにラベル名とともに機械学習用のデータとして保存される。

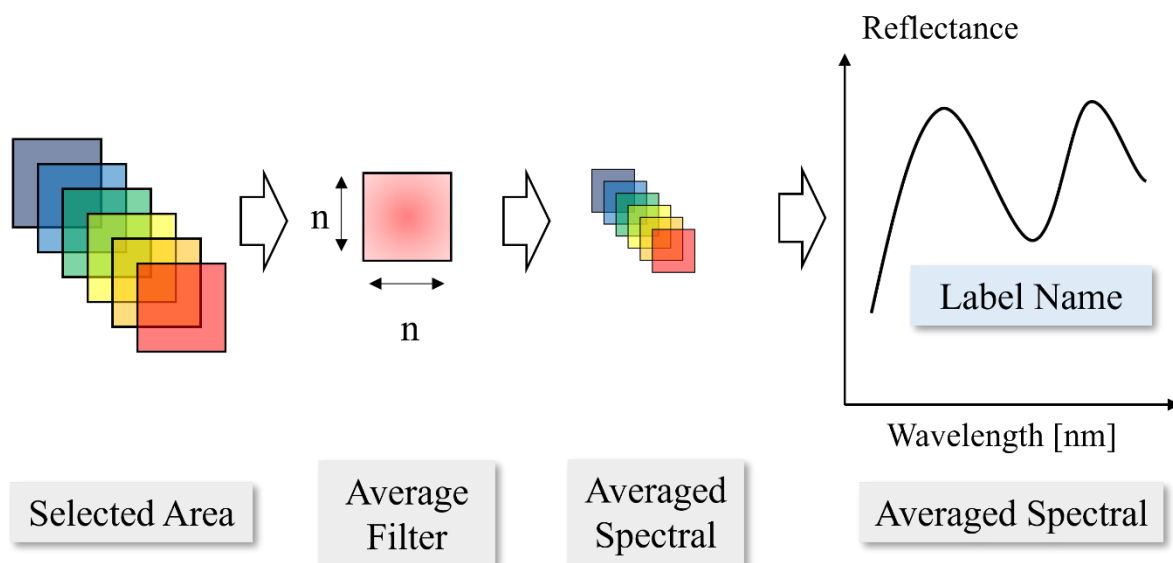


Figure 18 ROI selection and averaging spectral process.

保存されたトレーニング・データは、畳み込みニューラルネットワーク（CNN）、または MATLAB Classification Learner App / Regression Learner App を用いることにより、利用可能な多数の機械学習手法の 1 つを使用して分析される。ユーザは任意の機械学習モデルを選択することも、すべての学習モデルをトレーニングに利用し、比較することもできる。CNN は著者らによって開発された 1D-CNN モデルを採用しており、分類と回帰の機械学習モデルのリストは Table 5 と Table 6 に示されている。

Table 5 List of machine learning algorithms for classification task.

Name	Name	Name	Name	Name
CNN	Efficient Linear SVM	Medium Gaussian SVM	Weighted KNN	Medium Neural Network
Fine Tree	Gaussian Naïve Bayes	Coarse Gaussian SVM	Boosted Trees	Wide Neural Network
Medium Tree	Kernel Naïve Bayes	Fine KNN	Bagged Trees	Bilayered Neural Network
Coarse Tree	Linear SVM	Medium KNN	Subspace Discriminant	Trilayered Neural Network
Linear Discriminant	Quadratic SVM	Coarse KNN	Subspace KNN	SVM Kernel
Quadratic Discriminant	Cubic SVM	Cosine KNN	RUSBoosted Trees	Logistic Regression Kernel

Binary GLM Logistic Regression	Fine Gaussian SVM	Cubic KNN	Narrow Neural Network	
--------------------------------------	----------------------	-----------	--------------------------	--

Table 6 List of machine learning algorithms for regression task.

Name	Name	Name	Name	Name
CNN	Medium Tree	Medium Gaussian SVM	Exponential GPR	Trilayered Neural Network
Linear Regression	Coarse Tree	Coarse Gaussian SVM	Rational Quadratic GPR	SVM Kernel
Interactions Linear	Linear SVM	Boosted Trees	Narrow Neural Network	Least Squares Regression Kernel
Robust Linear	Quadratic SVM	Bagged Trees	Medium Neural Network	
Stepwise Linear	Cubic SVM	Squared Exponential GPR	Wide Neural Network	
Fine Tree	Fine Gaussian SVM	Matern 5/2 GPR	Bilayered Neural Network	

3.4.3.1. 分類と回帰

機械学習は、分類と回帰の 2 つのタスクに区分することができる。例えば、分類タスクには鉱物種の同定が含まれ、回帰タスクには鉱物組成濃度の推定が含まれる。これらのタスクのそれぞれに対して、様々な機械学習モデルが提案されている。数学的には、分類は、入力変数 (X) から出力変数 (Y) への、ターゲット、ラベル、またはカテゴリとしての関数 (f) のマッピングである。このプロセスは、提供されたデータポイントのクラスを予測するために、構造化データと非構造化データの両方に適用することができる[101]。機械学習と統計学における重要な課題は、回帰分析である。回帰研究の包括的な目的は、実数値関数（回帰関数）を推論することであり、その値は、1 つ以上の独立変数（入力変数としても知られている）に依存する応答変数または出力変数の平均を表す[102]。一般に、分類はラベルを予測するために採用されるのに対して、回帰は通常、量を予測するために利用される[103]。

3.4.3.2. 1D-CNN

このツールで扱うスペクトルデータは 1 次元データであるため、低コストで実装できる 1 次元 CNN が有効である。入力信号 x を長さ n 、畳み込みカーネル w を長さ k とする。さらに、ストライドを s 、バイアスを b とすると、出力 y の i 番目の要素は次のように計算される[88]。

$$y_i = \sum_{j=0}^{k-1} w_j x_{i:s+j} + b$$

畳み込み層の出力にはバッチ正規化と $ReLU$ 活性化関数が適用される。 z を $ReLU$ の出力とすると、式は以下のようになる。

$$z_i = ReLU(y_i) = \max(0, y_i)$$

そして、プーリング層でマックスプーリング処理が行われ、 p が出力される。

$$p_i = \max_{j=0, \dots, k-1} z_{i \cdot s + j}$$

このモデルは次に 1 次元グローバル平均プーリング層を採用し、最終的に 2 つの完全連結層からなる出力層を導く。完全連結層の出力を以下に示す。ここで W は完全連結層の重み、 b はバイアスである。

$$\sigma_j = activation(\sum_i W_{ji} p_i + b_j)$$

出力層はソフトマックス活性化関数を適用し、モデルはクロスエントロピー損失を用いて分類タスクを実行する。

$$\hat{y}_j = \frac{\exp(\sigma_j)}{\sum_k \exp(\sigma_k)}$$

回帰タスクは、最後のレイヤーを除いて同じアーキテクチャを採用した。モデルのアーキテクチャは Figure 19 に描かれている。ユーザが個別の畳み込みニューラルネットワーク (CNN) アーキテクチャを採用したい場合は、入力されるハイパースペクトルデータの次元に合わせて入力層を持つ CNN アーキテクチャを構築することで、任意のモデルを利用することができる。その結果、APiS はユーザが独自のモデルを利用することを可能にする。

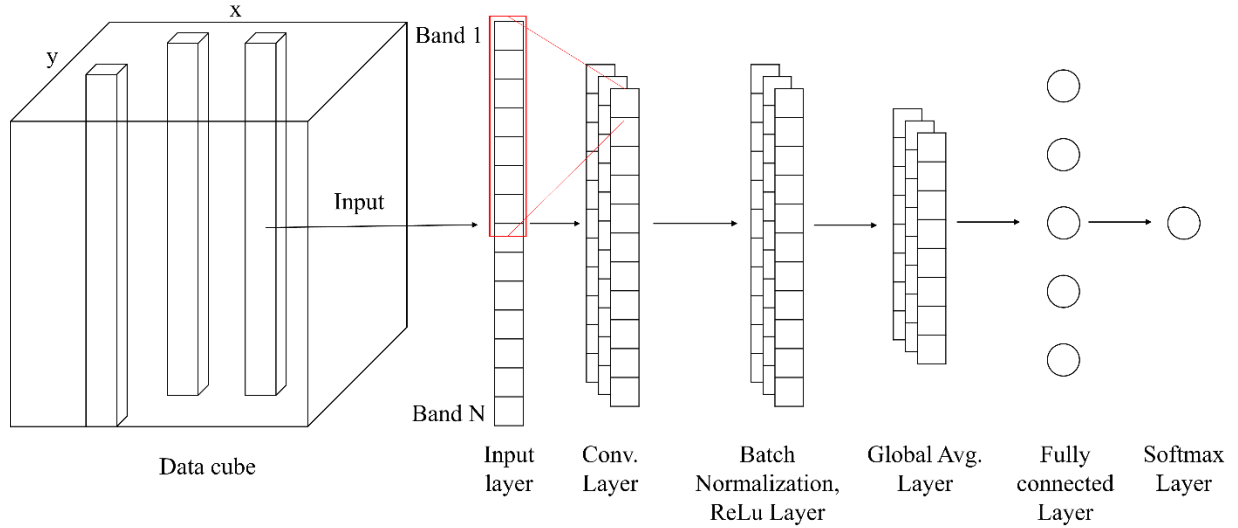


Figure 19 Architecture of 1D-CNN.

3.4.3.3. 決定木

分類モデルの構築に決定木(Decision Tree: DT)技法を用いることが、近年大きな支持を得ている。これは、これらのモデルが容易に理解でき、人間の思考プロセスに高い忠実性を示すという事実によるものである[104]。DT は、木をルート・ノードからいくつかのリーフ・ノードにソートすることで、インスタンスを分類する。分類プロセスは、ツリーのルート・ノードから始まり、属性値に対応する枝に沿って進行する。これには、ノードが定義する属性を調べることが含まれる。最も一般的に採用される分割の基準は、ジニ不純物の「ジニ」と情報利得の「エントロピー」であり、これらは数学的に次のように表現できる[101]：

$$\text{Entropy: } H(x) = - \sum_{i=1}^n p(x_i) \log_2 p(x_i)$$

$$\text{Gini}(E) = 1 - \sum_{i=1}^c p_i^2$$

3.4.3.4. 線形判別分析

判別分析は、Fisher の線形判別式を一般化したものである[105]。線形判別式は、多数のクラスのパターンを区別するのに使えるが、おそらく 2 クラスだけの状況で最もよく使われる。多次元空間での 2 クラス間の線形判別の標準は、フィッシャー判別式である。これは、各分布の 1 次モーメントと 2 次モーメントのみに基づいており、非常に高速に計算できるからである。さらに、分布の種類に依存しない分離尺度を最適化することが実証されている[106]。ここで、2 クラス分類を考えると、クラス内共分散行列 S_w の合計は、次式で表される[105]。

$$w \propto S_w^{-1}(m_2 - m_1)$$

ここで、クラス 1 の平均ベクトルを m_1 、クラス 2 の平均ベクトルを m_2 とする。

3.4.3.5. ロジスティック回帰

ロジスティック回帰として知られる統計モデルは、独立変数と質的従属変数の間の関係を明確にするために採用される。カテゴリ結果がロジスティック回帰モデルを用いて調査される場合、結果は通常バイナリであるため、モデルはバイナリ・ロジスティックモデルと呼ばれる [107]。ここで、データ集合 $\{\phi_n, t_n\}$ ($t_n \in \{0, 1\}$ および $\phi_n = \phi(x_n), n = 1, \dots, N$)、尤度関数 $p(t|w)$ は次のように表される [105]。

$$p(t|w) = \prod_{n=1}^N y_n^{t_n} \{1 - y_n\}^{1-t_n}$$

ここで、 $t = (t_1, \dots, t_N)$ および $y_n = p(C_1 / \phi_n)$ とする。

3.4.3.6. ナイーブベイズ

ナイーブベイズ分類器は、トマス・ベイズの遺理論であるベイズの定理に由来する確率的分類メカニズムである。このマッピングを確率論的に計算可能にするために、結合確率を事前確率と条件付き確率の乗算に変換する数学的演算が行われる [108]。ここで、ベイズ確率に関して、 $P(w/D)$ の事後確率は次のように示される [105]。

$$p(w|D) = \frac{p(D|w)p(w)}{p(D)}$$

ここで、 $P(w)$ は事前確率分布、観測データ $D = \{t_1, \dots, t_N\}$ 、条件付き確率 $p(D/w)$ である。

3.4.3.7. サポートベクターマシン (SVM)

サポートベクターマシン (SVM) は古典的な機械学習技術の代表であり、ビッグデータの分類問題がもたらす課題に対する潜在的な解決策を提供し続けている。特に、ビッグデータ環境におけるマルチドメインアプリケーションの開発を促進することができる [109]。ここで、カーネル関数 K に関しては、非線形ベクトル関数 ϕ を用いて以下のように表現される [110]。

$$K(x_i, x_j) = \phi(x_i) \cdot \phi(x_j)$$

ここで x は n 次元の数空間である。さらに、ラグランジュ乗数 λ_i を用いて SVM の決定関数を以下のように示す。

$$f(x) = \text{sign} \left(\sum_i \lambda_i y_i K(x_i, x_j) + b \right)$$

3.4.3.8. 近傍法

最近傍手法は、パターン認識、テキスト分類、物体認識など、多くの分野で非常に効率的かつ効果的で

あることが証明されている比較的簡単なアプローチである[111]。計量空間における最近傍探索は次のように定義できる[112]。計量空間 M 中の点 $P=\{p_1, p_2, \dots, p_n\}$ の集合と問合せ点 $q \in M$ が与えられたとき、計量距離 $d: M \times M \rightarrow R$ に関して q に最も近い要素 $NN(q, P) \in P$ を見つける。

$$NN(q, P) = \operatorname{argmin}_{x \in P} d(q, x)$$

3.4.3.9. アンサンブル学習

アンサンブルとは、集合的に予測を行う個々の分類器のグループのことで、それを集約して新しいインスタンスの予測を行う。これは委員会 (Committee) や複数の分類器と呼ばれることもある[113]。複数のモデルの予測を組み合わせることで、これらの戦略は複数のモデルを訓練し、単一のモデルの精度を高める[114]。

3.4.3.10. ニューラルネットワーク

人工ニューラルネットワークとして知られるコンピュータプログラムやアルゴリズムは、神経細胞の行動をシミュレートする努力から着想を得ている。パターン認識、分類、最適化などの目的で、物理学や化学を含むさまざまな分野で採用されている[115]。ここで $\{W_j\}$ を係数とし、 $j=1, \dots, M$ とし、スーパープリント (1) は対応するパラメータがネットワークの第 1 「層」にあることを示す。パラメータ $w_{(1)ji}$ を重み、パラメータ $w_{(1)j0}$ をバイアスと呼ぶことにすると出力は下記のように示される。

$$y_k(x, w) = \sigma \left(\sum_{j=1}^M w_{kj}^{(2)} h \left(\sum_{i=1}^D w_{ji}^{(1)} x_i + w_{j0}^{(1)} \right) + w_{k0}^{(2)} \right)$$

ここで、 y_k はネットワーク出力であり、 w はすべての重みとバイアスのパラメータをベクトルにまとめたものである。

3.5. ケーススタディ

3.5.1. 鉱物設定

APiS の性能評価のため、合計 4 つの鉱物サンプル、すなわち閃亜鉛鉱、黄鉄鉱、黄銅鉱、方鉛鉱を用意し、分類と回帰のための実験サンプルとして利用した。試料は粉碎され、成分が均一に分布するように攪拌された。APiS を使用すると、Figure 20 に示すように、ハイパースペクトルデータの読み取りと、任意の波長帯域の一部のスペクトルの表示が可能になる。表示された擬似 RGB 画像上で ROI を選択すると、その部分の平均波長スペクトルが APiS 上に表示される。Figure 21 は APiS 上に表示されたスペクトルの拡大図である。横軸は波長、縦軸は反射強度を表す。この図は、黄鉄鉱と黄銅鉱が類似したスペクトル形状を示すのに対し、他の鉱物試料は明瞭なスペクトルを示すことを示している。

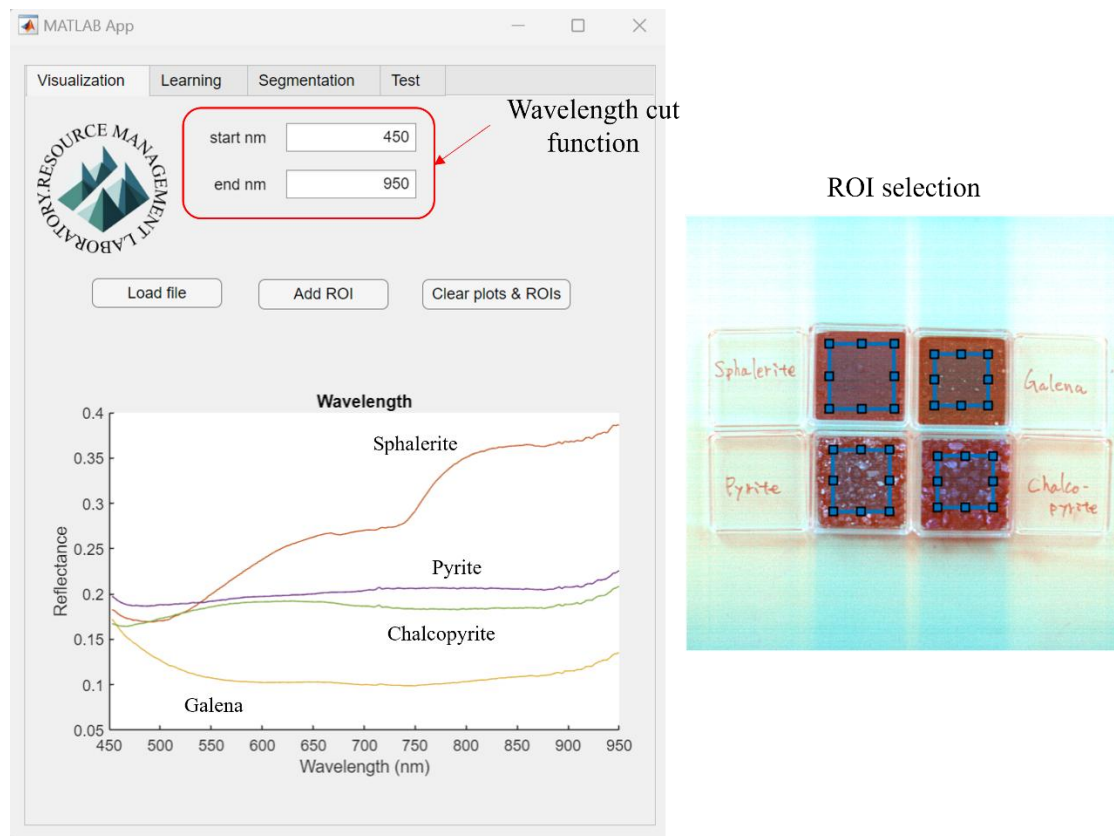


Figure 20 How to show spectral using the App.

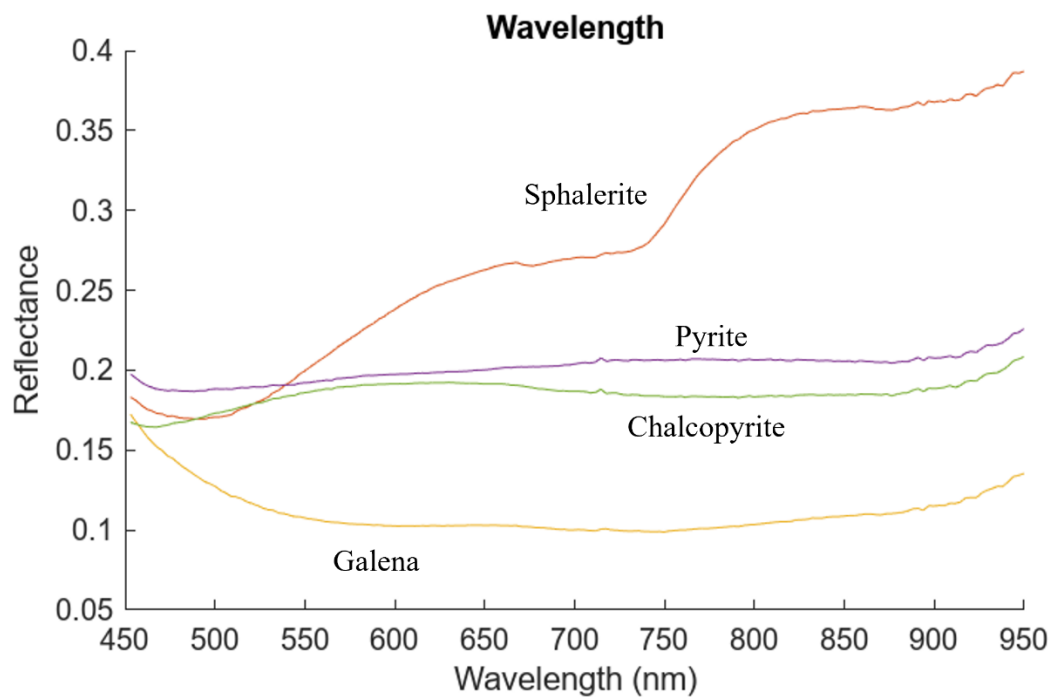


Figure 21 Spectral features of the samples.

3.5.2. データセットの準備

分類タスクは、生成された 4 つの鉱物サンプルに対して実施された。機械学習に必要なラベル付きデータセットの構築はこのアプリケーションの学習モジュールで行うことができる。Figure 22 に示すように、任意のラベル名をダイアログボックスに入力し、対応する領域の ROI を選択することで学習データの構築が完了する。本実験では、6 つのクラス（背景、プラスチックケース、黄鉄鉱、閃亜鉛鉱、方鉛鉱、黄銅鉱）をラベル名として指定し、合計 258,890 個のハイパースペクトル学習データを得た。その後、交差検証を行い、教師データ・検証用データ・テストデータの割合をそれぞれ 80%、10%、10%とした。



Figure 22 (a) input label name and (b) select label area.

3.6. 結果と考察

3.6.1. 分類タスク

3.6.1.1. 機械学習（CNN を除く）

Figure 23 は、CNN（畳み込みニューラルネットワーク）を除く 33 種類の機械学習モデルを APiS で作成したデータで学習させた結果である。青いバーは検証データでの精度を、オレンジのバーはテストデータでの精度を示している。この結果から、28 種類の学習モデルがテストデータを 90%以上の精度で分類できたことがわかる。Figure 24 は、特に頑健な性能を示した 2 次判別の混同行列と TPR/FNR を示す。横のセルは予測クラス、縦のセルは真のクラスを示す。Figure 25 はテストデータの ROC 曲線である。

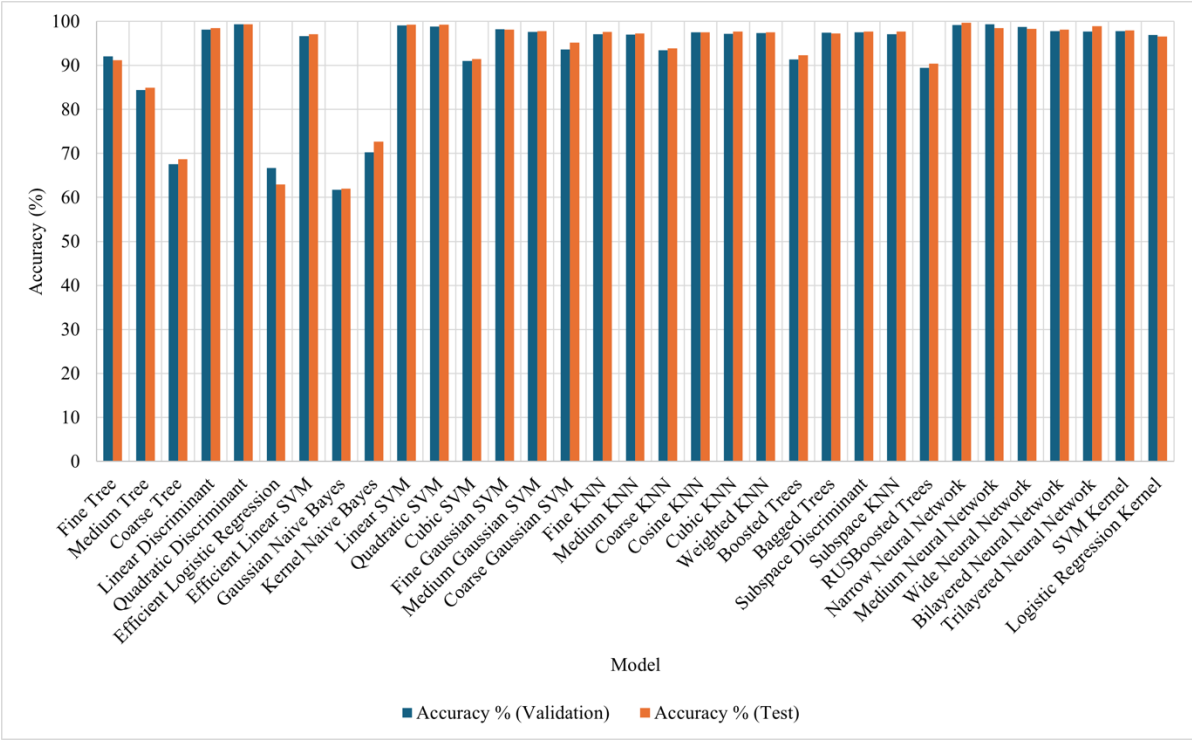


Figure 23 Result of machine learning for classification task.

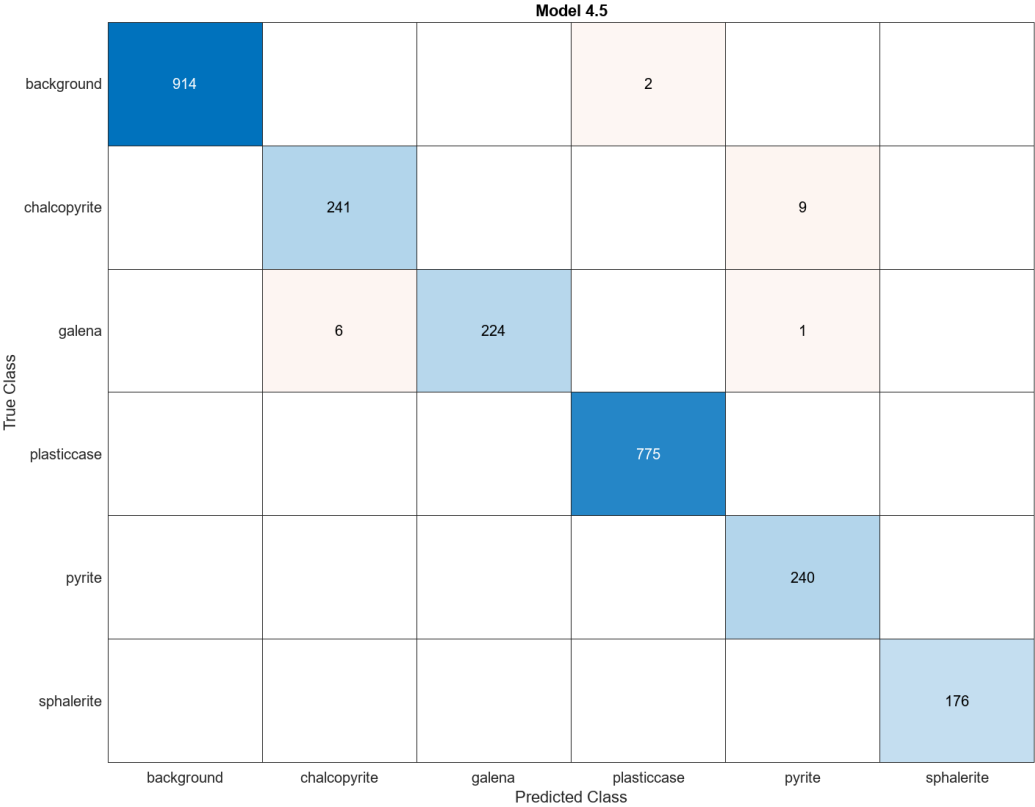


Figure 24 Confusion matrix and TPR/FNR of Quadratic Discriminant analysis.

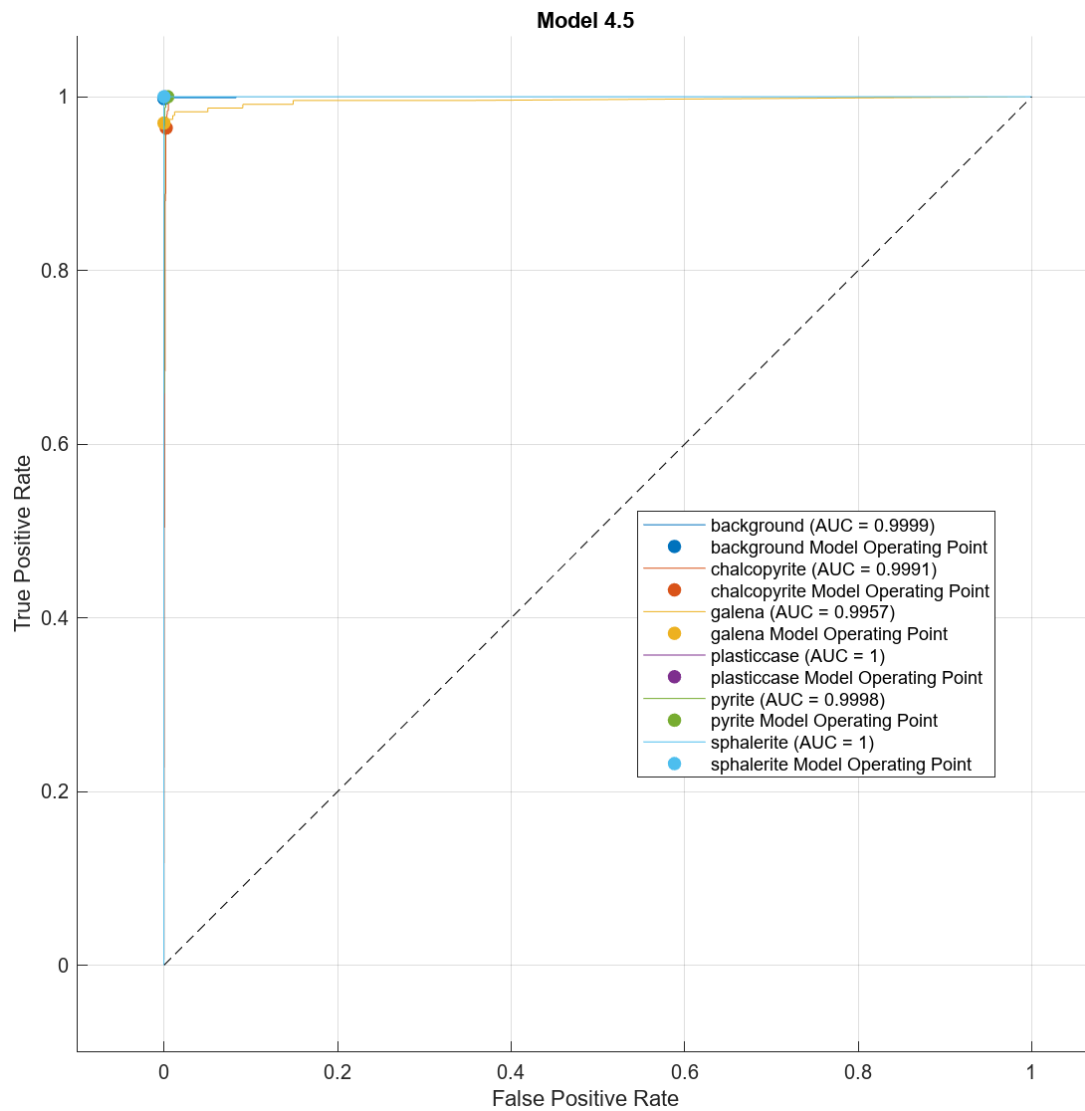


Figure 25 ROC curve of Quadratic Discriminant analysis.

Figure 26 は二次判別モデルを用いたテスト・ハイパースペクトルデータのセグメンテーションの結果である。図の左側 (a) はテストデータの RGB 画像、右側 (b) は RGB 画像に対するセグメンテーションの結果である。黄銅鉱以外の鉱物クラスも概ね正確に分類される傾向にある。逆に黄銅鉱のみ識別性能が低い。これは、Figure 21 に示すように、黄銅鉱と黄鉄鉱のスペクトルが類似しているためと考えられる。

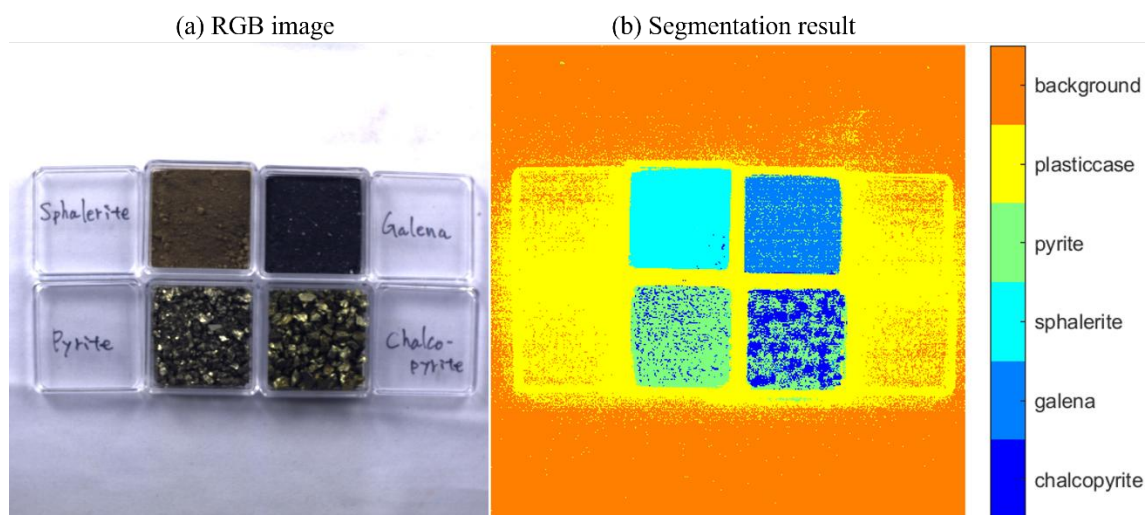


Figure 26 Segmentation result.

Figure 27 は、Test タブで得られたセグメンテーション結果の定量評価である。作成したグラントゥールースとセグメンテーション結果をロードして実行すると、両者の差分画像が表示される。マゼンタグラントゥールースセグメンテーション結果とグラントゥールースとの間の色の大きな不一致と、黄銅鉱に対応する領域の大幅な誤分類を示している。

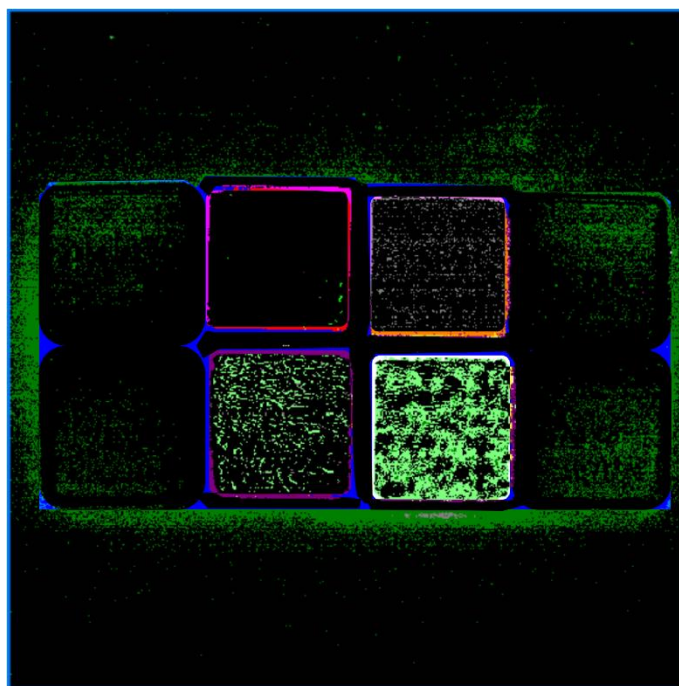


Figure 27 Difference between Ground Truth and segmented results.

3.6.1.2. CNN

この分析では、1次元の波長データを調べるために1次元畳み込みニューラルネットワーク(1DCNN)を使用して実施された。Figure 28 は学習の進捗状況を示している。上の青いプロットは教師データに対

する精度を示し、黒いプロットは検証データに対する精度を示す。下のオレンジのプロットは学習損失を示している。学習結果は、学習プロセスが 91.89%の精度で収束したことを示している。Figure 29 に混同行列を示す。

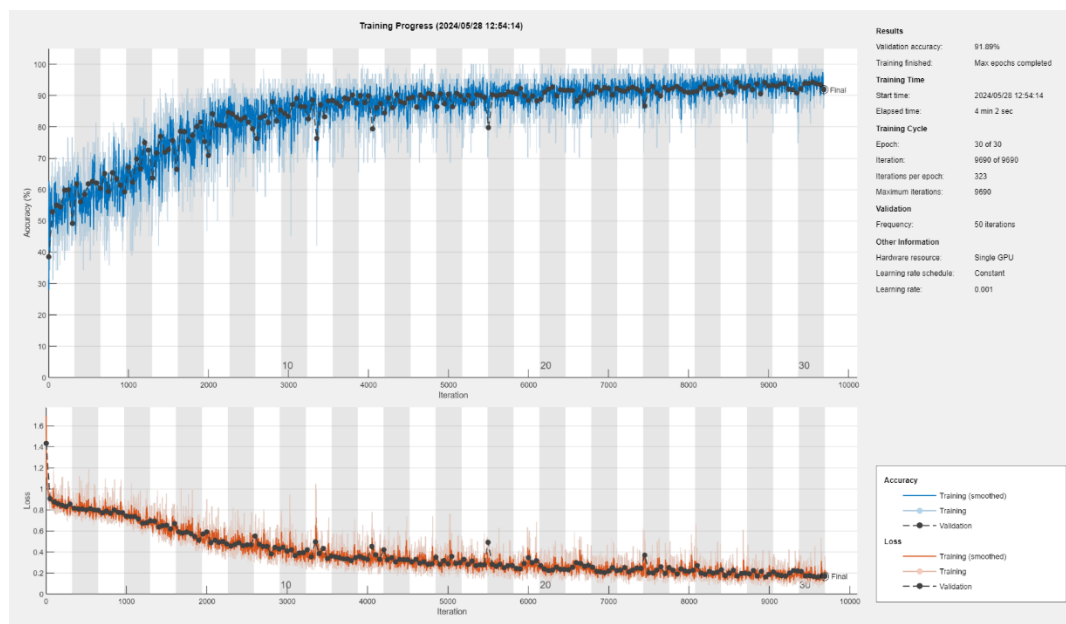


Figure 28 Training progress of CNN.

True Class	background	1837			9		
	chalcopryite	1	95	177	4	204	12
	galena			476		2	
	plasticcase	13			1524		
	pyrite	4	10	229	2	233	1
	sphalerite		36				308
		background	chalcopryite	galena	plasticcase	pyrite	sphalerite
		Predicted Class					

Figure 29 Confusion matrix of CNN.

テスト用ハイパースペクトルデータは、訓練された畳み込みニューラルネットワーク（CNN）を使用してセグメンテーションされた。Figure 30 はその結果を示しており、黄銅鉱と黄鉄鉱が誤って識別されていることを示している。残りのクラスは高い精度で分類されている。観察された誤分類は、APiS の性能の欠陥を示すものではなく、むしろ機械学習に内在する限界の結果である。分類の有効性を高めるに

は、訓練データセットの量を増やすか、機械学習のパラメータ値を変更すればよい。

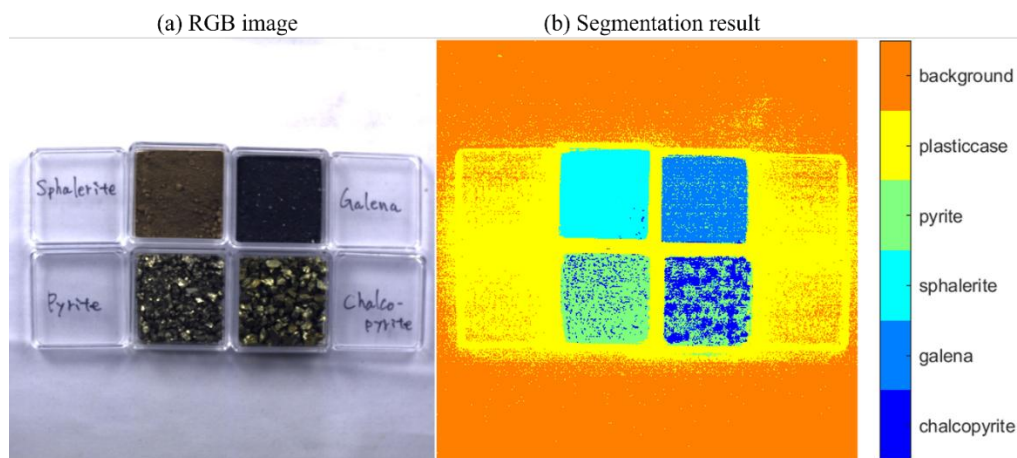


Figure 30 Segmentation result of CNN.

Test モジュールから、セグメンテーション結果を評価することができる。Figure 31 は、セグメンテーション結果画像とグラントトゥルースの差分画像である。この画像は、ユーザが作成したグラントトゥルースとセグメンテーションされた画像の間の不一致を表し、緑色またはマゼンタ色は、大きな乖離があることを示す。逆に、色がない場合は、グラントトゥルースとセグメンテーションされた画像の間に差がないことを示す。

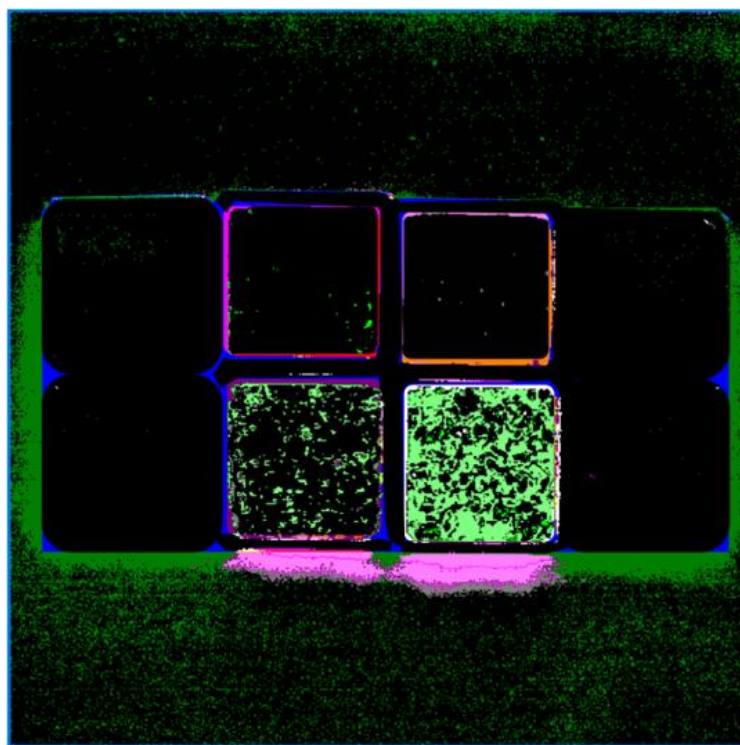


Figure 31 Difference between ground truth and segmented result.

3.6.2. 機械学習による分類の限界

機械学習による分類が、性能制限のない普遍的な解決策であると考えるのは誤りである。Figure 32 は、各スペクトルの余弦類似度を示している。値が 1 に近いほど、当該スペクトル間の類似性が高いことを示す。黄鉄鉱と黄銅鉱の場合、コサイン類似度の値は 0.9996 であることがわかる。スペクトルの類似度が高い場合、機械学習モデルによる分類は不可能となる可能性がある。それにもかかわらず、異なる波長範囲を採用することが効果的な解決策となる可能性がある。

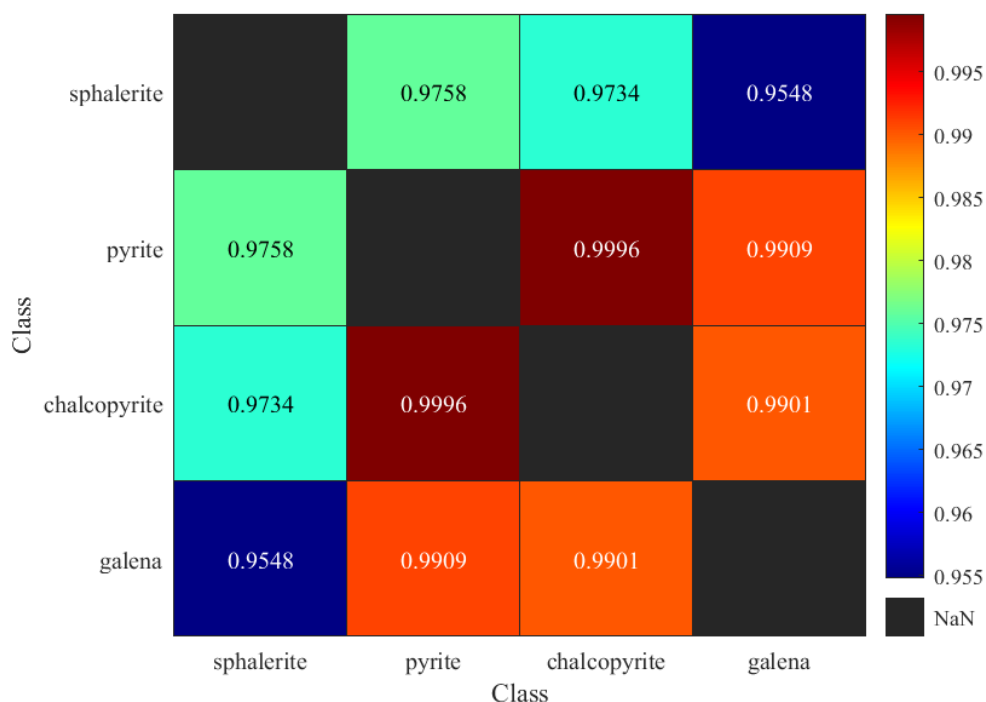


Figure 32 Cosine similarity of spectrum.

3.6.3. 回帰タスク

回帰分析用の試料として、粉末状の方鉛鉱と石英を質量%単位で混合した試料を準備した。Figure 33 に示すように、試料は質量パーセントで 10%刻みで調製し、各試料をハイパースペクトルカメラで撮影した。このセクションでは、鉱物濃度を推定するために回帰アプローチを採用した。この手法を用いることで、数値として出力することができ、より正確な値を得ることができる。その後、Figure 34 に示すように、APiS の学習モジュール機能を用いてハイパースペクトル画像上の関心領域 (ROI) を選択し、ラベリングした。ラベル名は方鉛鉱の質量百分率とした。

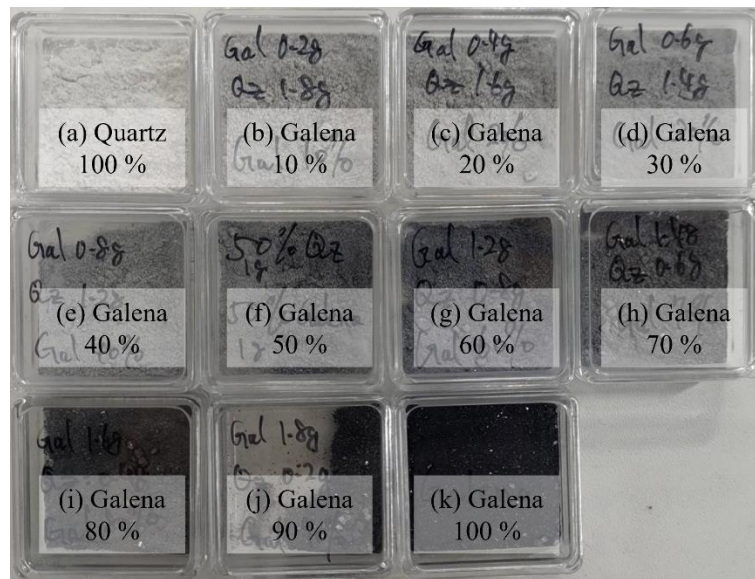


Figure 33 Samples for regression analysis.

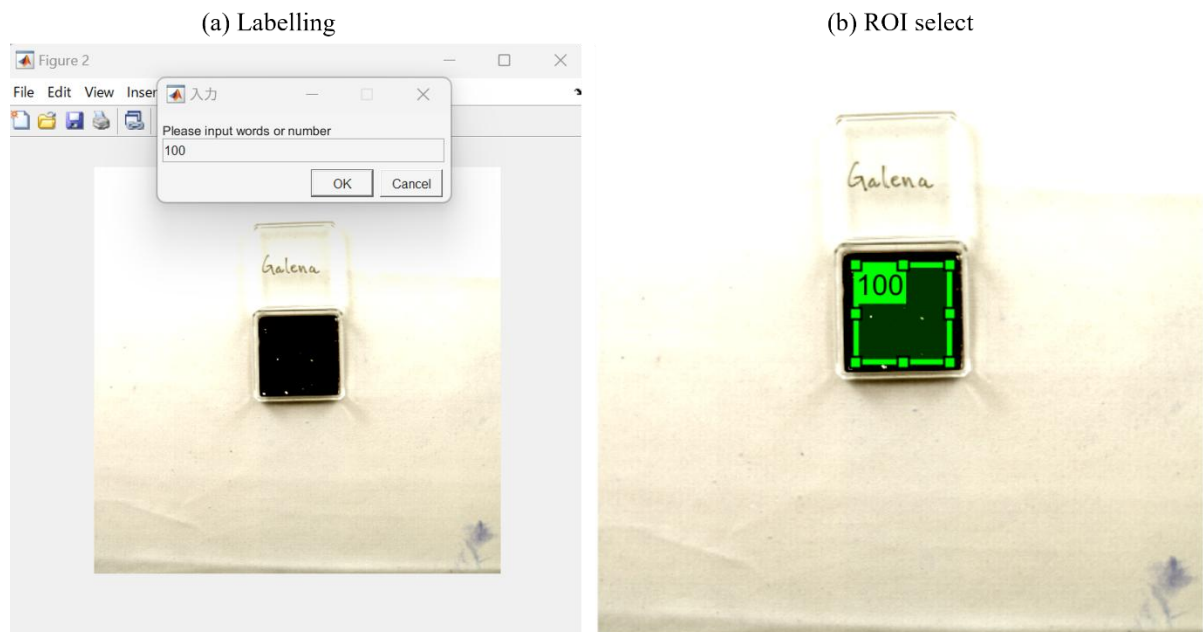


Figure 34 Labelling and ROI selection.

3.6.3.1. 機械学習 (CNN を除く)

トレーニングデータセットが構築されると、CNN で処理されたものを除き、機械学習で ROI によって選択された部分に対応する 25,889 点のスペクトルデータが解析の対象となった。クロスバリデーション法を採用し、トレーニングデータセット、検証データセット、テストデータセットの割合をそれぞれ 80%、10%、10%とした。Figure 35、Figure 36、Figure 37、Figure 38 は、各学習モデルの平均絶対誤差(MAE)、平均二乗誤差(MSE)、ルート平均二乗誤差(RMSE)、R 二乗の値を示している。各数学モデルは以下のように表される。ここで、 X_i は i 番目の予測値であり、 Y_i 要素は i 番目の実際の値である[116]。

ここで、MAE は次のように表される。

$$MAE = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m |X_i - Y_i|$$

MSE は次のように示される。

$$MSE = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (X_i - Y_i)^2$$

RMSE は次のように示される。

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (X_i - Y_i)^2}$$

R² 乗は次のように示される

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^m (X_i - Y_i)^2}{\sum_{i=1}^m (\bar{Y} - Y_i)^2}$$

ここで、RMSE で最も高い性能を示した Fine Gaussian SVM について、モデルの性能を評価するために、Figure 39 に予測応答対真応答の図を作成した。

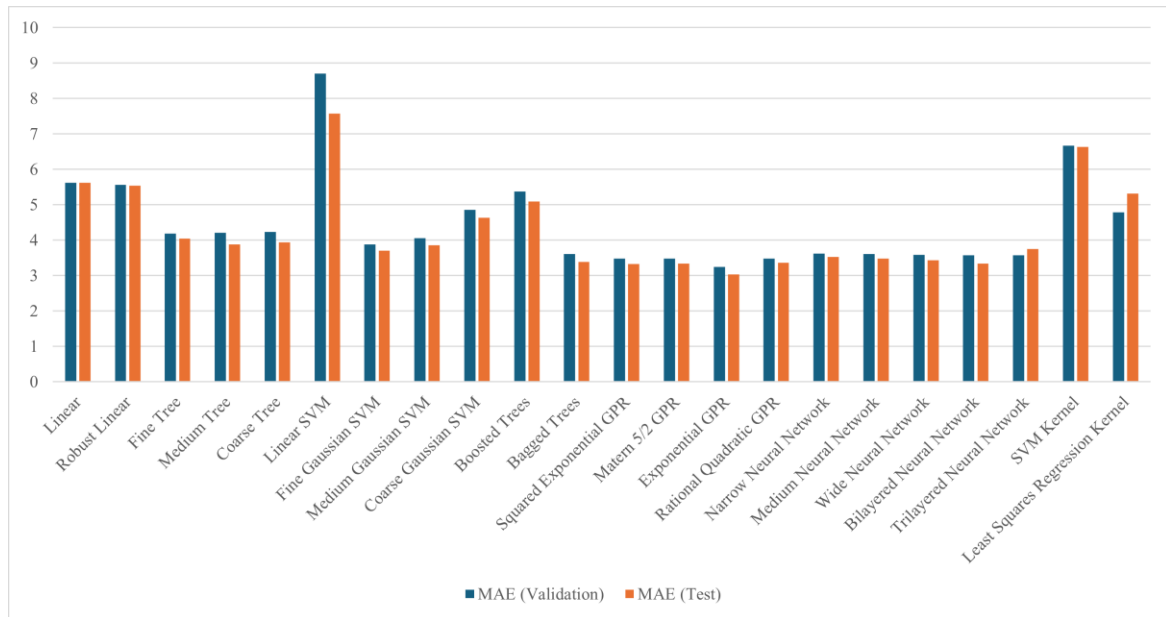


Figure 35 MAE for validation and test dataset.

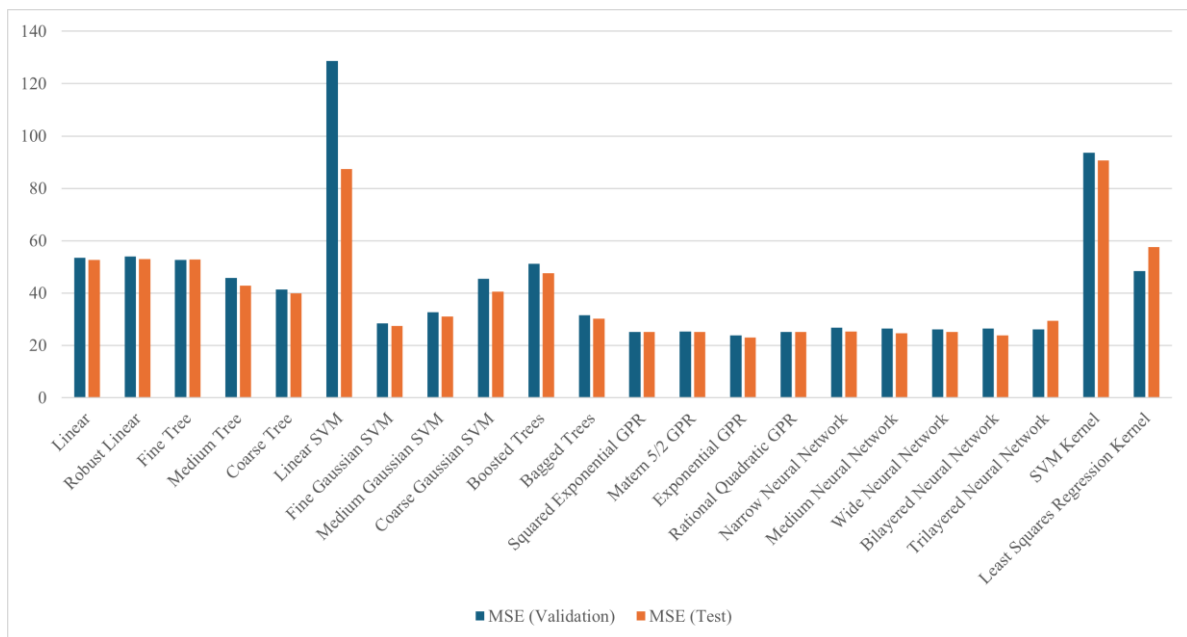


Figure 36 MSE for validation and test dataset.

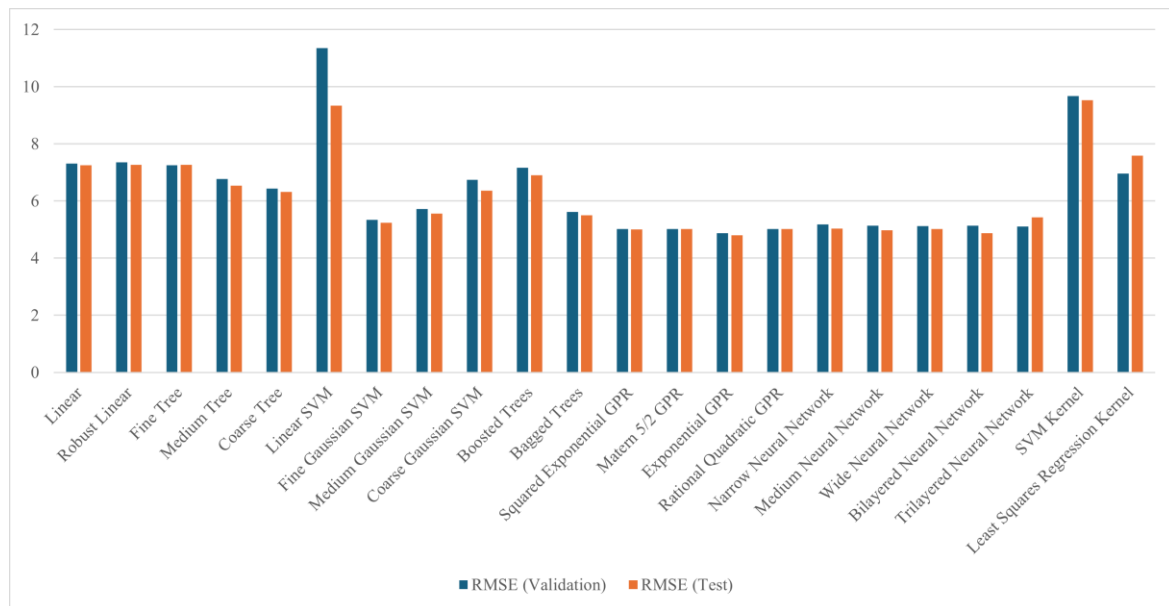


Figure 37 RMSE for validation and RMSE dataset.

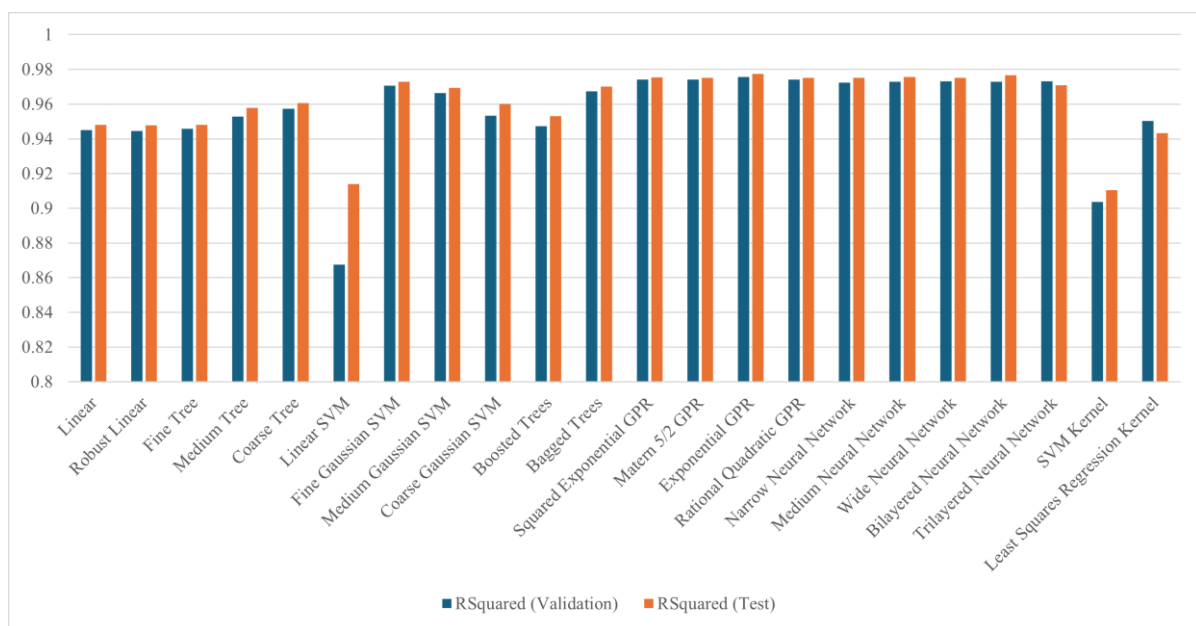


Figure 38 R Squared for validation and test dataset.

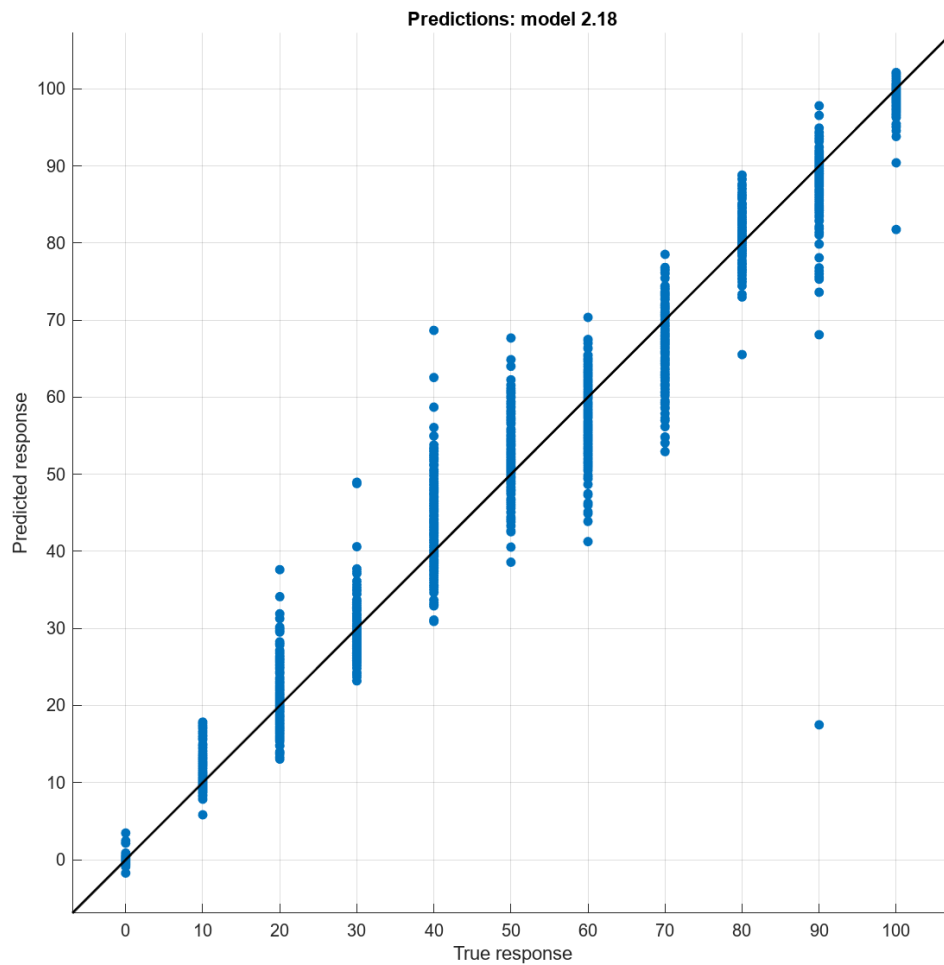


Figure 39 Predicted responses vs True responses.

Fine Gaussian SVM を適用して得られたセグメンテーション結果を Figure 40 に示す。左側 (a) はテストサンプルの RGB 画像、右側 (b) はセグメンテーション結果のカラーマップである。図から、方鉛鉱の密度が高くなるにつれて、セグメントが明るく表示されていることが観察され、学習プロセスが正常に実行されたことが示唆される。

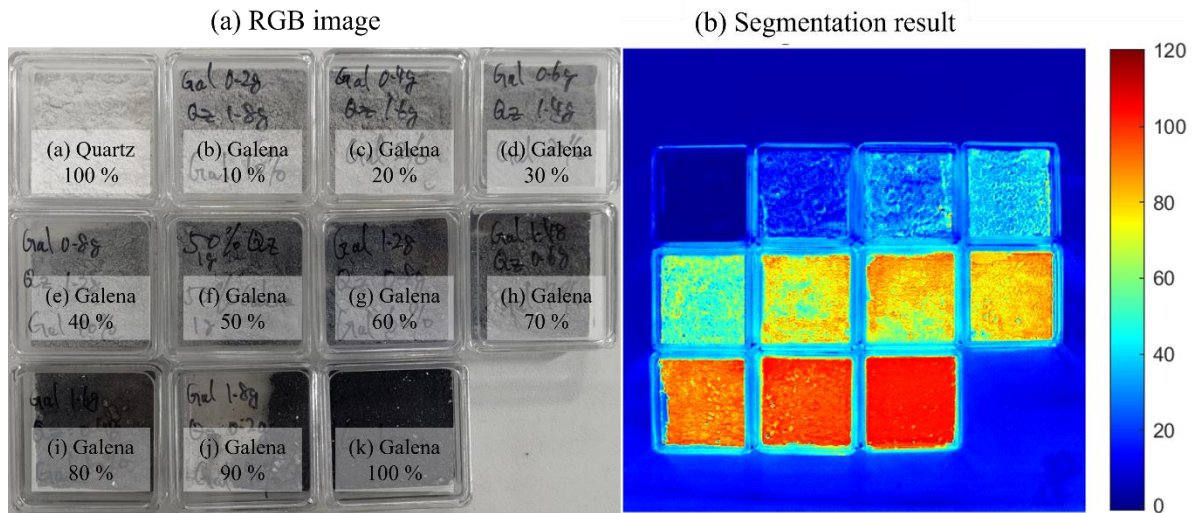


Figure 40 (a) Test sample's RGB image and (b) segmented result using Fine Gaussian SVM.

3.6.3.2. CNN

同一のデータセットを、畳み込みニューラルネットワーク (CNN) による学習とセグメンテーションの目的で利用した。学習曲線を Figure 41 に示す。図中の上図は、RMSE 学習試行における RMSE 値の変化を示し、下図のオレンジ色の図は損失を示す。添付の図に示されるように、二乗平均平方根誤差 (RMSE) は 7.8472 で収束を示した。続いて、テスト用ハイパースペクトルデータを、学習済みの畳み込みニューラルネットワーク (CNN) モデルを用いてセグメンテーションした。セグメンテーション結果を Figure 42 に示す。方鉛鉱の濃度が高くなるにつれて画像が明るくなり、回帰分析が正常に実行されたことを示している。

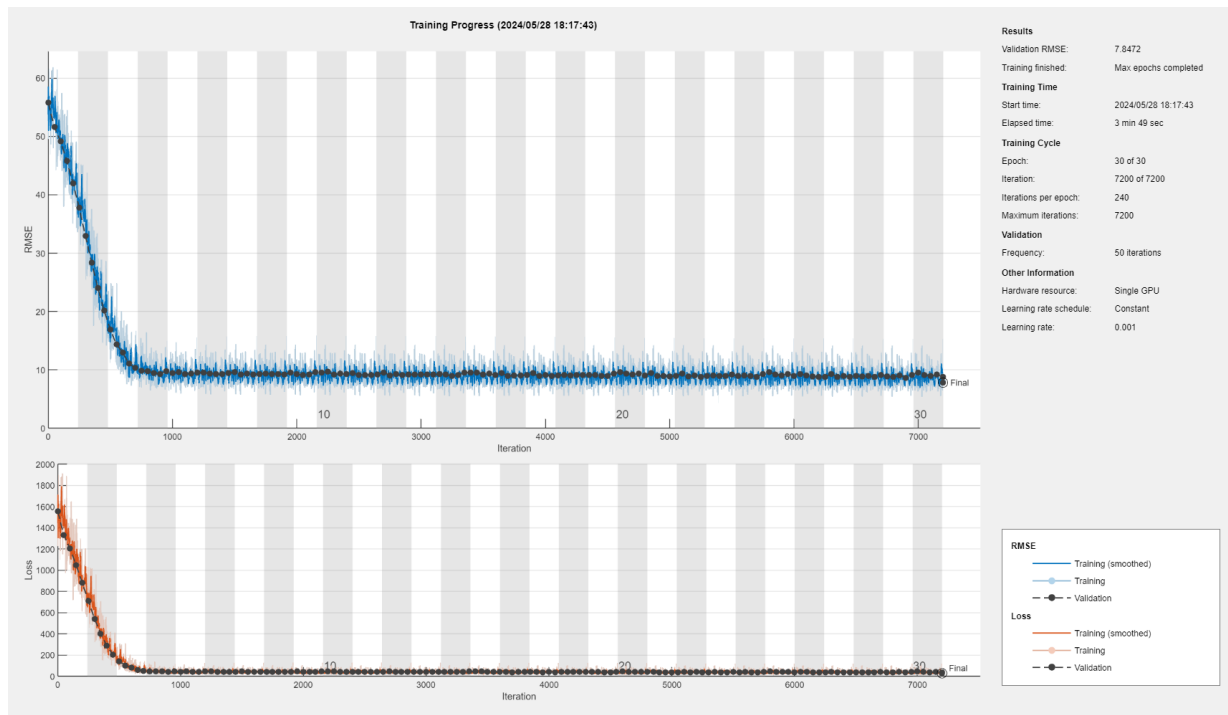


Figure 41 Training progress of regression CNN.

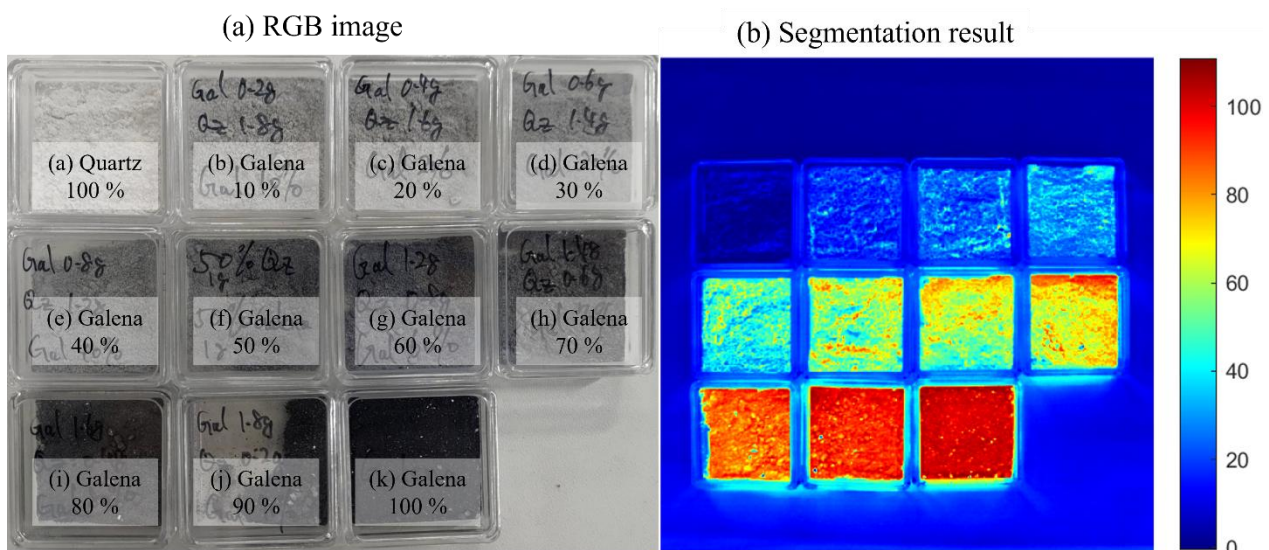


Figure 42 (a) Test sample's RGB image and (b) segmented result using CNN.

3.7. 構築された解析アプリ APiS に関する結論

ハイパースペクトルデータは、その波長分解能により高い識別性能を示す。特に、ハイパースペクトルデータを利用した地質冶金分野は、人工知能技術の登場により、近年大きな進歩を遂げている。地質冶金分野での応用には、地質マッピング、ブラストホールのサンプリング、自動鉱物学的同定、ハンドヘルド分光分析などがあります。しかし、専門家以外のユーザによるハイパースペクトルデータの解析は、データの特徴的な特性によって制約を受けており、ユーザフレンドリな解析ツールの開発は長年の悲願であった。著者らによって開発された AI ハイパースペクトル解析ツール APiS は、ユーザビリティ指向の

哲学に基づく革新的なアプリケーションである。MATLAB ユーザであれば誰でも、コードを書く必要なく、ボタンをクリックするだけでハイパースペクトルデータの高度な機械学習処理を実行することができる。分類と回帰の機能に加え、APiS は対話的なラベリングと前処理を実行する機能を備えている。

4. 鉱物種・粒径の同定フレームワークの開発

4.1. 本章の背景

近年の新興国における資源需要の増大は、世界的な鉱物資源獲得競争の中で、資源国における資源ナショナリズムの台頭を引き起こしている。非再生可能資源である鉱床の平均品位は時間の経過とともに低下するため、資源開発の効率を高める必要がある。これには岩石分類が重要な役割を果たす[71], [72], [73]。低品位鉱物の効率的な鉱物処理技術の開発が重要になる。今後、低品位鉱物の探査が活発化し、鉱滓（低品位鉱物）が多く産出されることが予想される[74], [75]。鉱石を採掘した後、鉱物種や粒径に応じて適切な鉱物処理方法を迅速に選択できれば、より効率的な操業につながる。このプロセスの概略図を Figure 43 に示す。本システムが想定する実施段階は、採掘後、鉱物の粗粒度選別、色彩選別を行った後、選鉱を行う前の段階である。このシステムの主な目的は、選鉱すべき鉱物種と鉱物の粒度を識別することによって、より有用な選鉱の実施を支援することである。この識別は、選鉱プロセスを補助する補完的な役割を果たす。この目的のために、採掘とプロセス計画の決定の基礎となる経済、生産、環境データを提供する。深層学習による鉱物の同定後、粒の大きさに応じて、エアショットとレール切り替え装置を用いて鉱物の分離を行い、高品位鉱物と低品位鉱物を分離する。

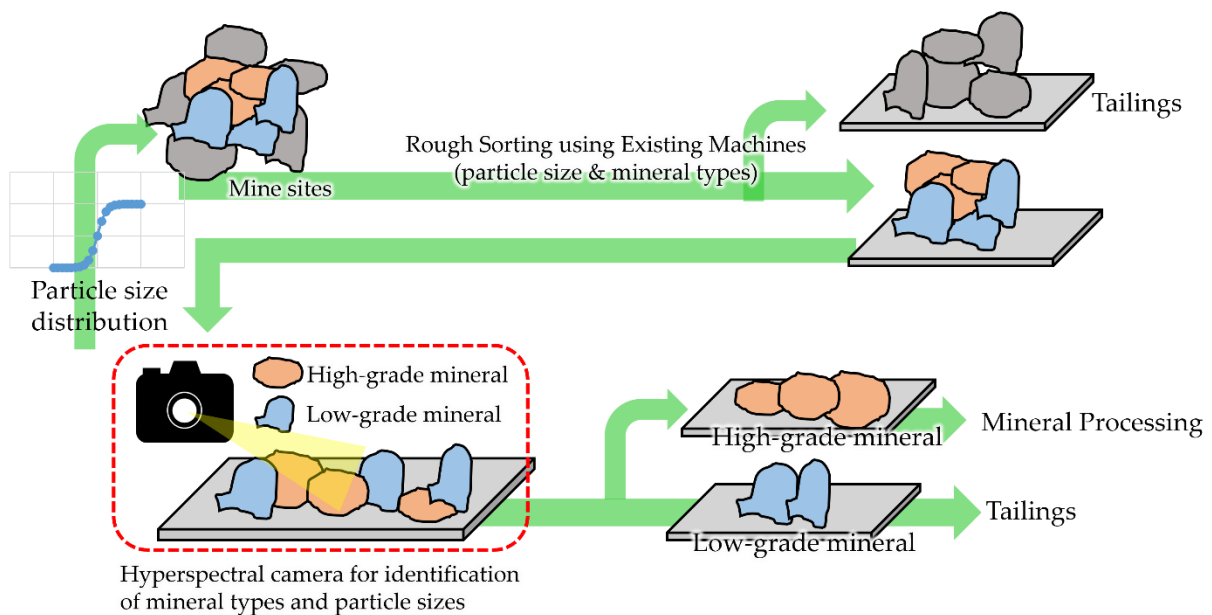


Figure 43 Schematic diagram of mineral processing using hyperspectral imaging and deep learning classification.

提案するシステムは、鉱石が採掘され既存の選別機で大まかに選別された後に、より詳細な粒度判定を行うために設計されている。その結果、既に数種類に選別された鉱石に対してより詳細な粒度判定を行うことが可能となり、粒度分布測定を補完するデータの測定が可能となる。また、例えば赤鉄鉱の採掘は火薬による発破で行われるが、発破時に鉱物の粒度が細かすぎると品位の希釈につながる。このシステムでは採掘後の鉱石の粒度データを発破作業にフィードバックすることで、発破の最適化を図っている。

鉱物の同定のために、業界的な標準として、X 線回折 (XRD) や誘導結合プラズマ発光分光法 (ICP-OES) のような分析装置を利用する。しかし、これらは実験室でのプロセスであり、プロセスの実行には

多大な時間と資源を必要とするため、分析されたサンプルの量は、鉱山の操業に比べ比較的少ない[76]。選鉱における鉱物種の同定に関しては、特に幾何冶金学とプロセス鉱物学の分野で、技術やアプローチが開発され、確立されている[77], [78], [79], [80], [81], [82]。冶金学は、採掘の全段階が技術的、環境的、社会的観点から最適な方法で実施されることで、持続可能な開発を促進する[83]。プロセス鉱物学は、前駆鉱石の鉱物学、鉱物会合、粒径、テクスチャーを徹底的に特性化することで、冶金フローシートを最適化できるという認識から発展した学問である[83]。複合領域としての地学冶金学とプロセス鉱物学は、様々な業務に様々なレベルで適用されており、これらは、より最適な選鉱プロセスを構築する試みにおいて、機械学習を取り入れるように発展してきた[84]。このような最近の取り組みを背景に、ハイパースペクトル画像[85]と深層学習を組み合わせることで、地学冶金学とプロセス鉱物学のためのブロックモデルの開発と鉱物評価のための新しいアプローチを分類前の鉱石に対して開発した。我々はこのシステムを「前鉱物処理」と名付けた。このシステムは、採掘後の鉱石と選鉱工程前の鉱石に対して実装され、得られた鉱物種や粒度などのデータは後の選鉱工程の補助データとして提供される。深層学習は、特徴的なデータ量を自動的に抽出できる点で、従来の他のモデルよりも格段に性能が高い機械学習モデルであり、様々な分野で成果を上げている[86], [87]。鉱物処理の分野では、深層学習の応用はまだ十分に検討されておらず、本研究は鉱物処理の分野での深層学習の発展に貢献することを目的としている。鉱物同定のもう一つの方法は、地質学者または同等の専門知識を持つ人がサンプルを目視検査することである。この方法は多少の偏りはあるものの、専門家の能力に関してはかなり正確であるが、大量の試料を観察することは現実的には不可能である。この場合、提案されたシステムの方が望ましい可能性がある。肉眼で得られる情報は、赤、青、緑の3つの波長帯からなる RGB (Red・Green・Blue) 画像であり、これらのデータを深層学習することで専門家と同じように鉱物の識別が可能になると考えられる。

本研究では、可視光領域から近赤外領域の一部(400-1000nm)までの波長域の分光データを取得し解析した。通常人間が認識できる波長域は赤、青、緑の3波長域であるが、ハイパースペクトルイメージングを用いると66の高分解能スペクトルバンドをデータとして取得することが可能である。取得したハイパースペクトルデータは数万個の比較的大きなデータを含んでいるため、これを大量のデータを解析できる深層学習を用いて処理した。この目的のために、本研究では畳み込みニューラルネットワーク(CNN)を使用した。CNNは、入力画像データの特徴を自動的に抽出することができ、本研究では、入力スペクトルデータの各鉱物に特有の波長ピークや傾きなどの特徴を自動的に抽出・学習した[88], [89], [90]。鉱物の種類と粒径を識別する目的で、鉱物処理用の岩石の種類を識別するための実験試料として、黄銅鉱、方鉛鉱、および3種類の粒径の異なる赤鉄鉱を選択し、これら5種類の試料のハイパースペクトルデータを取得してCNNを用いて解析し、CNNが許容レベルの鉱物分類を実行できるかどうかを判定した。

この5つの鉱物を実験に選んだ理由は2つある。第一に、黄銅鉱と方鉛鉱は硫化鉱物、赤鉄鉱は酸化鉱物であり、このシステムによって硫化鉱物と酸化鉱物を分類することができる。第二に、工程内で粒度を判別することで粒度をコントロールでき、鉱物処理の効率化が図れるからである。実際の操業現場では、分級すべき鉱石の種類は少ない[73], [74], [91], [92], [93]。そのため、操業現場で分級される鉱物の種類が少ない場合には、分級性能は十分であると想定される。本研究では、鉱物分離において重要なプロセスである硫化鉱物と酸化鉱物の分級と粒度の同定に着目した。まず鉱物種のみを同定する実験を行い、次に粒径の異なる3種の赤鉄鉱を同定し、最後にそれらをまとめて同定する実験を行った。岩手県和賀

仙人鉱床の赤鉄鉱、秋田県阿仁鉱床の極赤鉄鉱、秋田県揚野沢鉱山の方鉛鉱、兵庫県多田鉱山の黄銅鉱である。CNN を用いたシステムは、鉱物の種類の同定だけでなく、赤鉄鉱の粒径の分類にも汎用性が高い。

4.2. 理論

地質学者などの専門家は、鉱物の色や筋、反射率など、特定の鉱物種に特有の外見的な鉱物の特徴を観察することで、視覚的に鉱物種を識別する。深層学習では、鉱物のデータをランダムに学習させ、鉱物種を定義するパターンを認識し、人間の専門家と同様に鉱物種を定義する固有の特徴を抽出して分類を行う。深層学習を採用することで、人間よりも遥かに高速に視覚データを解析することが可能となる。視覚的識別は RGB 画像に基づく識別であるが、専門家が鉱物の種類を識別する際には視覚データだけでなく、鉱物の比重や硬さなどの特徴も考慮する。そこで本研究では、ハイパースペクトルイメージングを採用し、視覚データのみで正確な鉱物識別ができるように補正した。そのため、大量のデータを扱うことができる機械学習を用いてデータ処理を行った。大量のデータから自動的にパターンを学習する機械学習は、教師あり学習と教師なし学習の 2 つのモデルに分類される [94]。

教師あり学習は入力データにラベル付けを行う学習法であり、非教師あり学習はラベル付けを行わない学習法である。本研究では、得られた鉱石のハイパースペクトルデータに鉱石の種類を示す真理ラベルを付与し、教師あり学習に用いた。非教師あり学習は、鉱物の種類に基づく分類がないことと、取得された鉱物のハイパースペクトルデータのラベルが取得時に既知であったため、本研究では用いなかった。教師あり学習では、入力データの特徴を自動抽出できる深層学習手法である CNN を採用した。CNN は、入力された鉱物のスペクトルから、光の反射強度、傾き、ピークなど、鉱物特有と考えられるスペクトル形状を自動認識・抽出・学習する。CNN はノイズの影響を受けるが、データ量が増えるにつれてその影響は無視できる程度になる。本研究では、深層学習の中でも画像処理に特化した CNN を用いて、スペクトルデータのピークや強度、傾きといった鉱物のスペクトル傾向を解析した。CNN は、入力データの特徴を重視し、演算を繰り返すことで学習を行うニューラルネットワークである。Figure 44 に示す入力 RGB 画像と Figure 45 に示す入力ハイパースペクトルデータに対して畳み込みと呼ばれる演算を行った。ここで、畳み込みされた出力データは、 x が画像、 $m \times n$ がカーネルサイズ w が重み b がバイアスを次式で表される。

$$a_{ij} = \sum_{s=0}^{m-1} \sum_{t=0}^{n-1} w_{st} x_{(i+s)(j+t)} + b$$

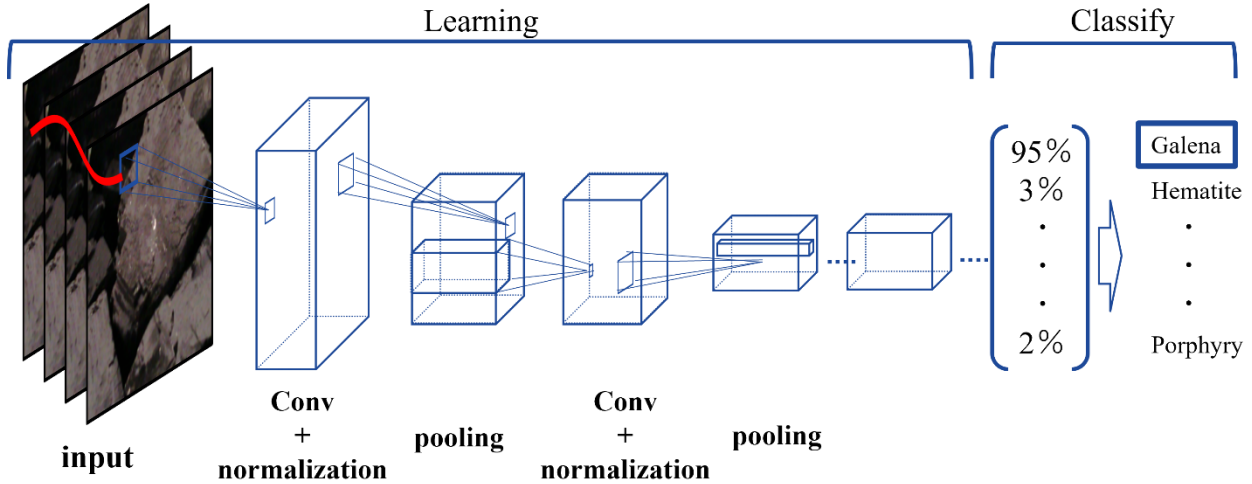


Figure 44 Structure of the convolutional neural network (CNN) for red, green, and blue (RGB) images.

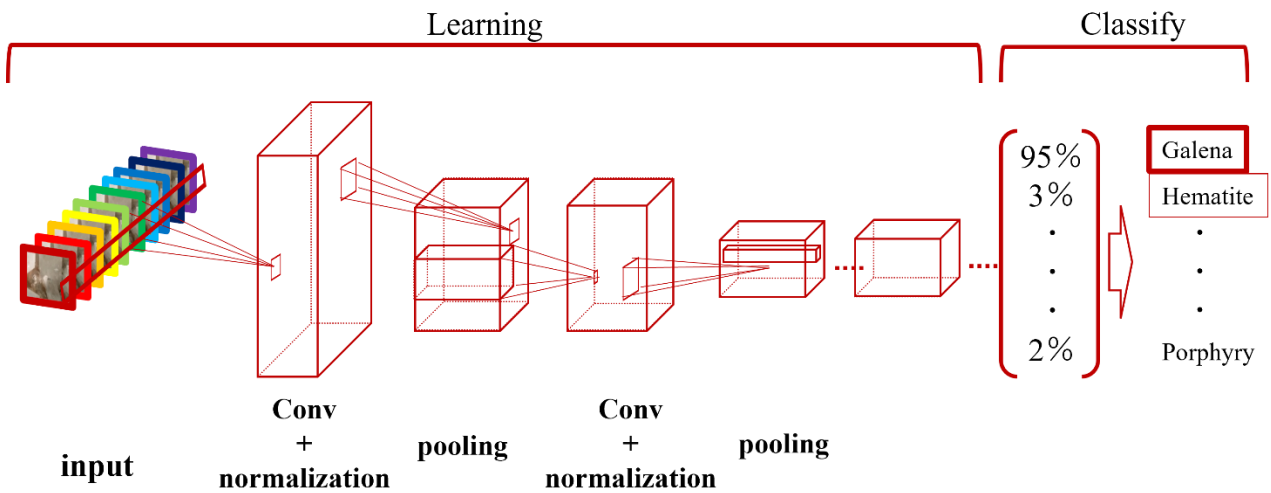


Figure 45 Structure of the CNN for hyperspectral data.

出力データ a は正解ラベルと照合され、誤りがあれば重み w が更新され、学習が最初から行われる。CNN は複数回の畳み込み計算を行うため、複数の畳み込み層を持つ。強調された特徴を持つ画像は次の畳み込み層に渡され、層が深くなるにつれて、画像はより強調される[92]。学習用のスペクトルデータは 1 次元データであるが、これらのデータを擬似的な 2 次元データとみなして CNN に入力した。ハイパースペクトルデータが鉱物識別に有効であることを RGB 画像と比較して検証した。RGB 画像については、学習コストを節約し効率を高めるために、他のデータセットで事前学習された GoogLeNet を用いた転移学習を採用した[95]。GoogLeNet のネットワークは深さ 22 層で 1000 種類の画像に対して学習済みのものを使用し、本研究で使用するデータセット用に層を修正してネットワークの一部を再学習した。GoogLeNet のアーキテクチャを Figure 46 に示す[95]。

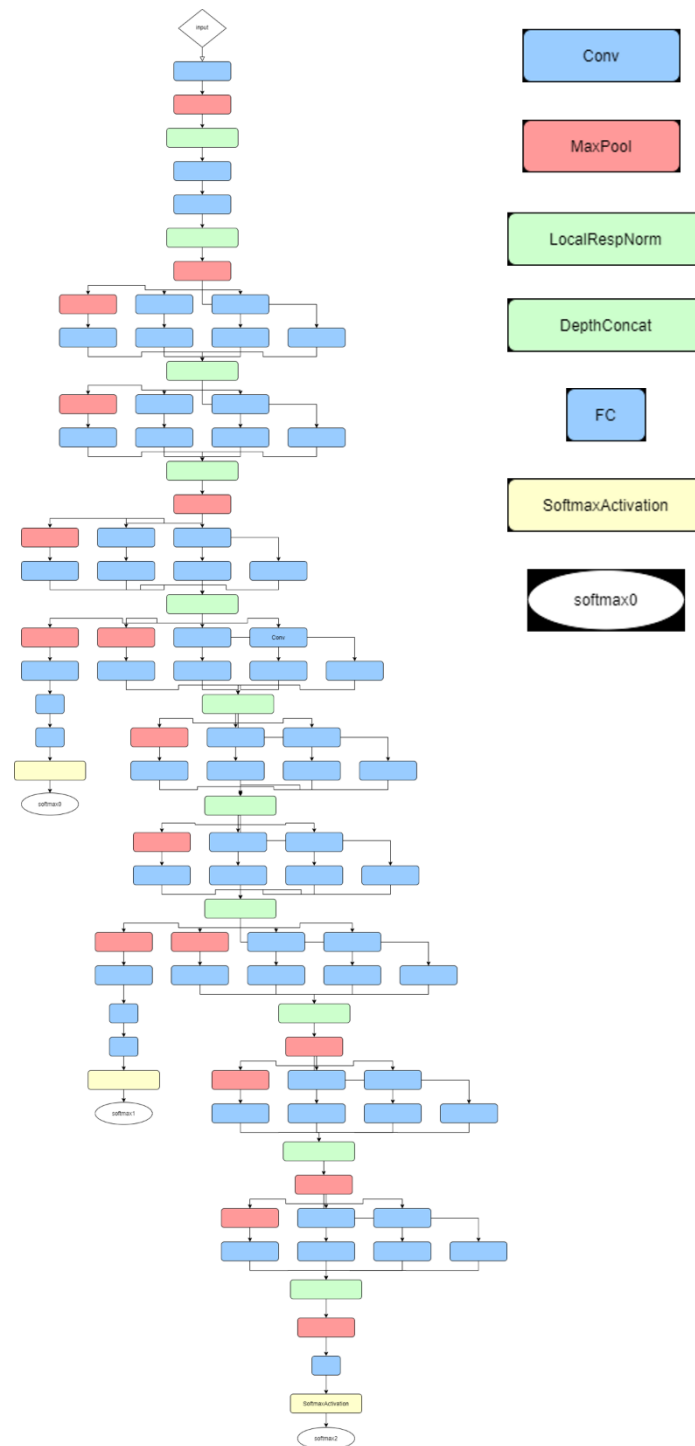


Figure 46 An architecture of GoogLeNet. An architecture of GoogLeNet.

ハイパースペクトルデータについては、Table 7 に示すように、ハイパースペクトルデータ用に事前に訓練されたネットワークがなかったため、畳み込み層、正規化層、プーリング層、ソフトマックス層で構成されるニューラルネットワークをゼロから構築した。どちらのネットワークも、特性を抽出するための畳み込み層、活性化関数として使用するための ReLu 層、出力結果を得るための出力層を持つという点では同じ構造を持っている。ニューラルネットワークは、CNN から出力された予測ラベルを入力グラウンドトゥールスラベルと照合し、検証データを用いてこれをネットワークにフィードバックすることで

最適化された。グラントトゥールスラベルは鉱物の種類名を示し、予測ラベルは CNN によって予測された鉱物の名前を示す。

Table 7 Layers of CNN use for hyperspectral data analysis.

Layers	Layer size	Stride	Padding size	Layers	Layer size	Stride	Padding size
ImageInputLayer	[1, 204]	/	/	Convolution 2dLayer	[1, 3]	1	[0, 1]
Convolution 2dLayer	[1, 3]	1	[0, 1]	Convolution 2dLayer	[1, 3]	1	[0, 1]
Convolution 2dLayer	[1, 3]	1	[0, 1]	BatchNormalizationLayer	/	/	/
BatchNormalizationLayer	/	/	/	ReluLayer	/	/	/
ReluLayer	/	/	/	MaxPooling 2dLayer	[1, 2]	[1, 2]	/
MaxPooling 2dLayer	[1, 2]	[0, 1]	/	FullyConnectedLayer	/	/	/
Convolution 2dLayer	[1, 3]	1	[0, 1]	FullyConnectedLayer	/	/	/
Convolution 2dLayer	[1, 3]	1	[0, 1]	FullyConnectedLayer	/	/	/
BatchNormalizationLayer	/	/	/	SoftmaxLayer	/	/	/
ReluLayer	/	/	/	ClassificationLayer	/	/	/
MaxPooling 2dLayer	[1, 2]	[1, 2]	/				

4.3. 試料・方法

4.3.1. RGB 画像撮影

Figure 47 は、(a) 大きな粒子 (0.5-1.0 cm) を含む赤鉄鉱、(b) 小さな粒子 (<100 μm) を含む赤鉄鉱、(c) 非常に小さな粒子 (<20 μm) を含む赤鉄鉱、(d) 方鉛鉱、および (e) 黄銅鉱のそれぞれの RGB 画像の一例を示している。本研究では、ハイパースペクトルデータと比較するために、深層学習で取得した鉱物の RGB 画像を用いて鉱物を同定できるかどうかを検討した。

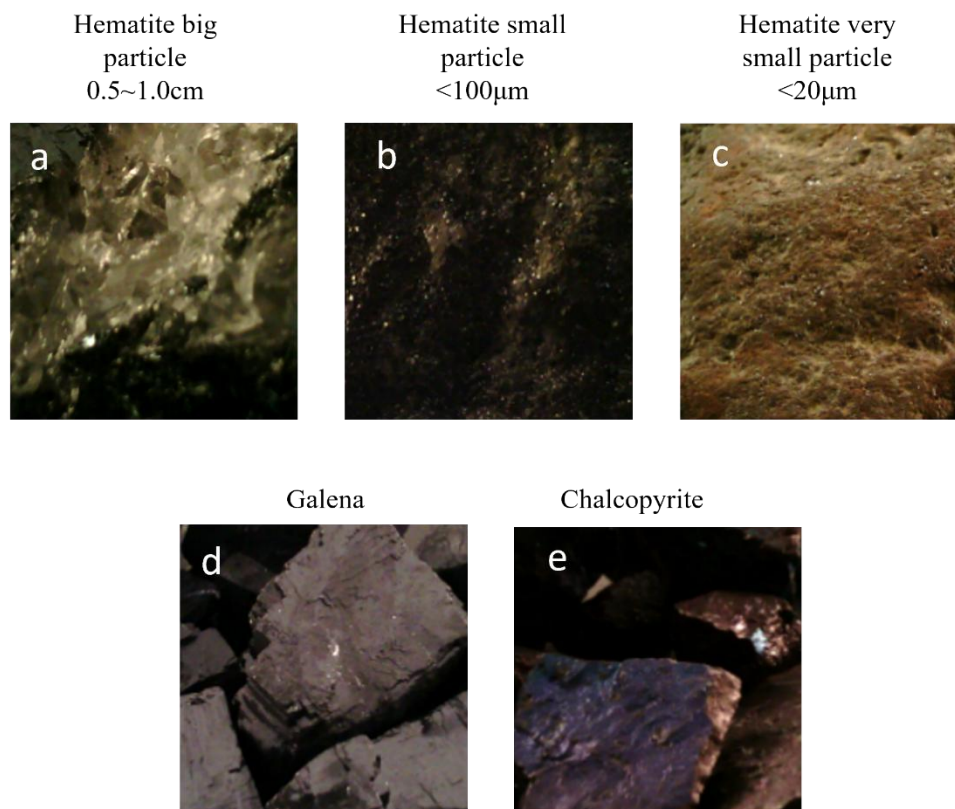


Figure 47 Five types of minerals for classification: (a) hematite large particles, (b) hematite small particles, (c) hematite very small particles, (d) galena, and (e) chalcopyrite.

4.3.2. ハイパースペクトル画像撮影

ハイパースペクトルカメラとは、光を波長ごとに分光して撮影することができる特殊なカメラである。今回使用したスペクトラルイメージング社の Specim IQ は、可視光領域の一部である 400nm から近赤外領域の 1000nm までの光の波長を 204 の波長帯域に分割することができる。肉眼で認識できる波長は赤、青、緑の 3 波長帯であり、ハイパースペクトルカメラを用いることで高分解能の波長を得ることができる。専門家による鉱物の同定は肉眼でも可能であることから、ハイパースペクトルデータでは肉眼で得られる情報よりも詳細な光の反射など、鉱石に固有の特徴があると考えられる。本研究では、5 種類の鉱物のスペクトルデータを深層学習を用いて解析した。

4.3.3. 実験

Figure 48 (a), (b)に示すように、暗室でハロゲンライトを 3 方向から照射し、光源とした。ハロゲン光では 400nm から 1000nm の全帯域を照射できるが、蛍光灯や LED では照射できない。ハロゲン光のフィラメントは時間の経過とともに加熱され、波長のピークが高い側に遷移するが、前回の実験で数時間使用した後に取得した波長データではこの効果は見られなかったため無視した。標準的なカメラでは、光を赤、青、緑の 3 等分し、それらからの反射光を取得する。用いたハイパースペクトルカメラでは光は同じ強度の 204 等分されるため、標準的なカメラよりも強い光でなければならない。露光時間を長くすることでこれを補うことができるが、最も簡単な方法は照明の強度を上げることである。

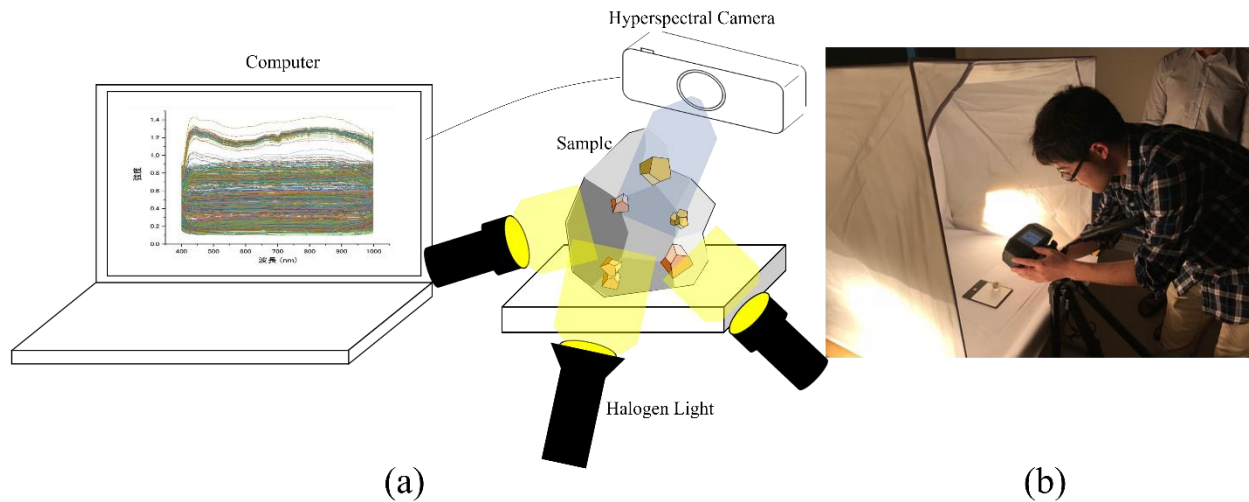


Figure 48 Arrangement of the experiment: (a) schematic diagram of experiment, and (b) photo of the set-up of experiment.

また、取得したハイパースペクトルデータの各領域で得られる光の強度をさらに均一化するために影ができないように各光源の数および角度を配置した。ハイパースペクトルカメラによる 1 回の撮像時間は約 1 分で終了し、撮像したデータは波長スペクトルデータとしてコンピュータ上に表示することができる。鉱物については光源による影を避けるため、ハイパースペクトルカメラで平坦面を表にしてデータを取得した。鉱物の表面粗さはそれぞれ異なるが、光源の配置によって影は可能な限り排除された。そのため、取得データの品質が深層学習モデルのロバスト性を担保している。実際の鉱山では選鉱前に鉱石のハイパースペクトルデータを取得して分析することで鉱石を選別することができる。今回の実験では正確なデータを取得するために光量を厳密に調整したがカメラ側で露光時間を調整するため、光量を制御する必要はない。また、深層学習は取得したハイパースペクトル画像ごとに鉱物種を判定するため、一部のデータが不十分であっても大半のデータが正常であれば全体の鉱物判定結果に大きな影響はない。

ハイパースペクトルカメラで取得したデータはデータキューブと呼ばれ、縦方向に 512 画素、横方向に 512 画素、深さ 204 画素に対応する波長データの格納形式を持つ。深層学習では、データ数が増えるほど学習精度が向上する。本研究では、深層学習のためのデータセットを増やすため、縦横の画素を 16 等分し、各撮像画像に対して縦横各 32 画素、深さ 204 画素の 256 個のデータキューブを用意した。ハイパースペクトルデータの特徴として、取得波長域が RGB 画像よりも広いことが挙げられる。そこで、ハイパースペクトルデータをスライスして深層学習で解析するのではなく、ハイパースペクトルデータを波長方向に分割して波長データを解析した。ハイパースペクトルデータを 16 分割したのは、スペクトル異常の分類に必要な計算量を減らし、個々の画素のノイズや異常が CNN の全体的な能力に影響を与えないようにデータを標準化するためである。これにより、 512×512 画像からの異常が重要でないほど平均化することなく、各異常の重要性を尊重した画素数が選択された。次に、16 分割されたデータを縦横 1 画素が 1 画素となるように平均化し、Figure 49 に示すような縦横 1 画素、深さ 204 画素のデータに加工した。

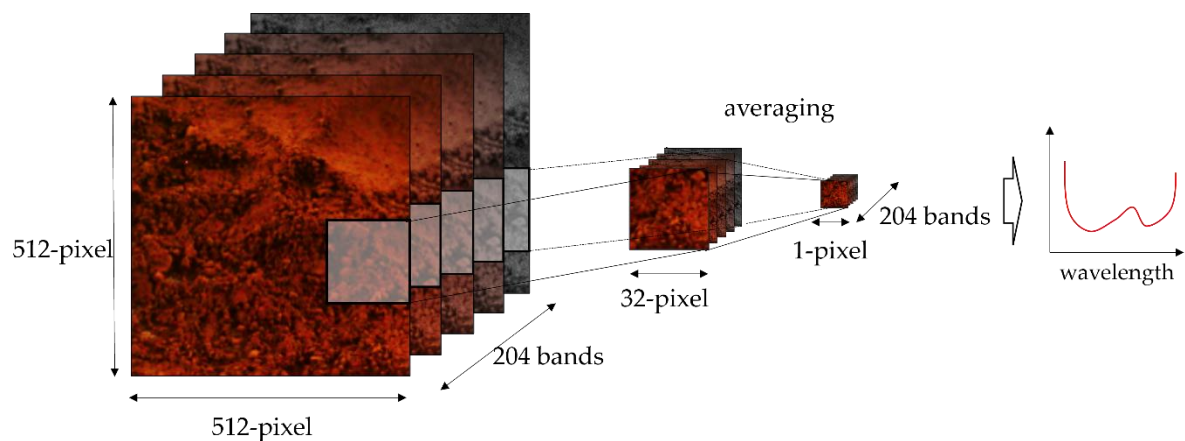


Figure 49 Processing of the hyperspectral data for deep learning.

4.3.4. 取得データ

Figure 50 はハイパースペクトルカメラを用いて得られたスペクトルデータである。横軸は波長(nm)、縦軸は反射強度、各色線は得られたスペクトルデータを表す。ハイパースペクトル画像は、RGB 画像に比べて 66 倍の波長領域を含むことを考えると、RGB 画像よりも情報量が多い。これらの鉱物のスペクトル形状から、鉱物種を決定する特徴的なピークや傾きを手作業で抽出することは困難であるため深層学習を用いてこれらの特徴を自動抽出した。また、画像入力層で正規化を行っているため、元データに対する正規化は行っていない。ハイパースペクトルデータには 204 もの波長バンドが含まれるが、深層学習を用いることでこのような大量データの処理が可能となる。Figure 51 に RGB 画像とハイパースペクトルデータのスペクトル帯域の違いを示す。ここで同図 (a) は RGB 画像のスペクトルの概要であり、同図 (b) はハイパースペクトルデータの概要を示している。

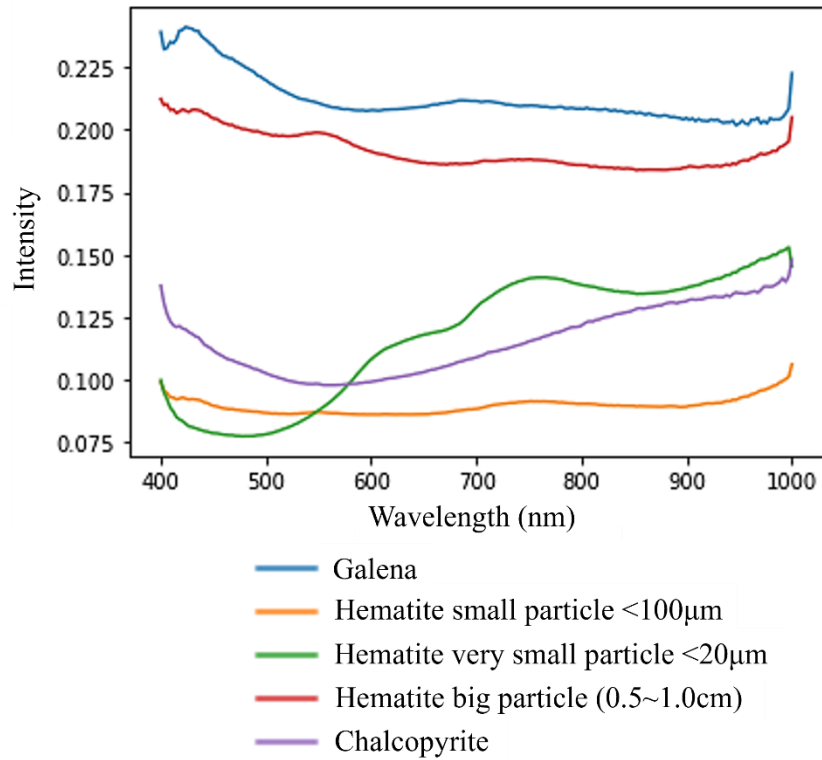


Figure 50 Averaged obtained hyperspectral data of each mineral.

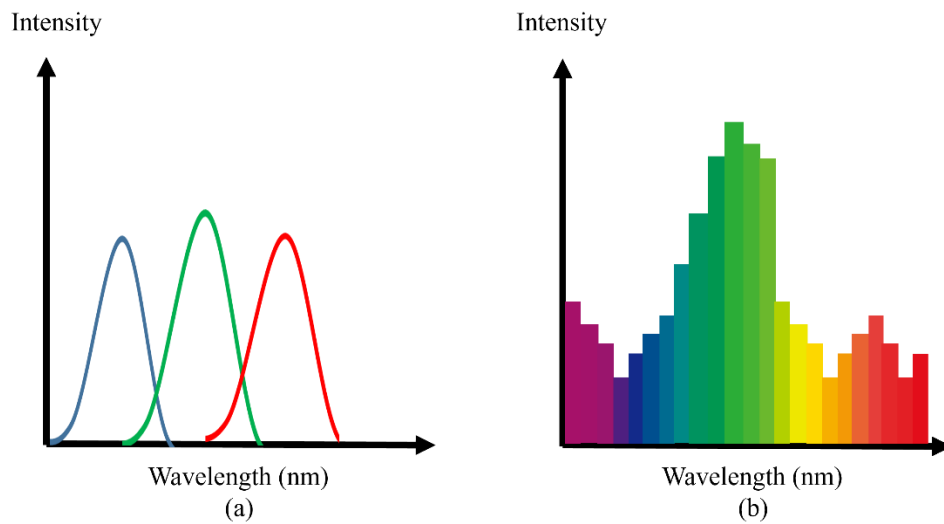


Figure 51 The difference between (a) an RGB image and (b) hyperspectral imaging.

4.4. 結果

4.4.1. RGB 画像に対する深層学習を用いた解析

ハイパースペクトルカメラで画像を撮影する場合、RGB 画像もイメージキューブとは別に同時に取得される。取得した RGB 画像を分割することでデータ数を増やした。ハイパースペクトルデータと RGB 画像の鉱物識別精度を比較するために、5 種類の鉱物の RGB 画像に対して深層学習を行った。データの

処理速度を高速化するため、事前に学習させたネットワークで学習を行う転移学習を選択してネットワークを構築した。伝達学習ではネットワークの重みが調整済みであるため、5種類の鉱物のRGB画像データセットに対しては、GoogLeNetの最後の学習層と分類層のみを学習層に置き換え、再学習を行った。学習データセットをTable 8に示す。データセットは学習データ、検証データ、テストデータから構成される。学習データはネットワークの学習に使用し、検証データは学習結果のフィードバックに使用し、テストデータは学習済みモデルのテストに使用した。RGB画像のサイズは $16 \times 16 \times 3$ ピクセルである。

Table 8 Data set of the RGB images.

RGB images				
$16 \times 16 \times 3$ pixels	Training data	Validation data	Test data	Total
Galena	770	96	97	963
Chalcopyrite	770	97	97	994
Hematite large particles	765	95	96	956
Hematite small particles	806	101	101	1008
Hematite very small particles	819	103	102	1024

分析結果を、学習曲線についてはFigure 52 (a)に、損失関数についてはFigure 52 (b)に示す。ここで(a)の横軸は反復を、縦軸は分類精度を示す。(b)では、横軸が反復、縦軸が分類の損失を示している。学習精度は、分類データ数を分母、正解データ数を分子として求めた。(a)の学習曲線を見ると青い線で示した学習データについては、反復の開始から終了まで分類精度が上昇していない。これはGoogLeNetが、学習中の隠れ層のニューロンを一定の確率で無効にするドロップアウト法を含んでいるため、学習精度が検証精度を下回り学習損失が検証損失を上回ったためである。

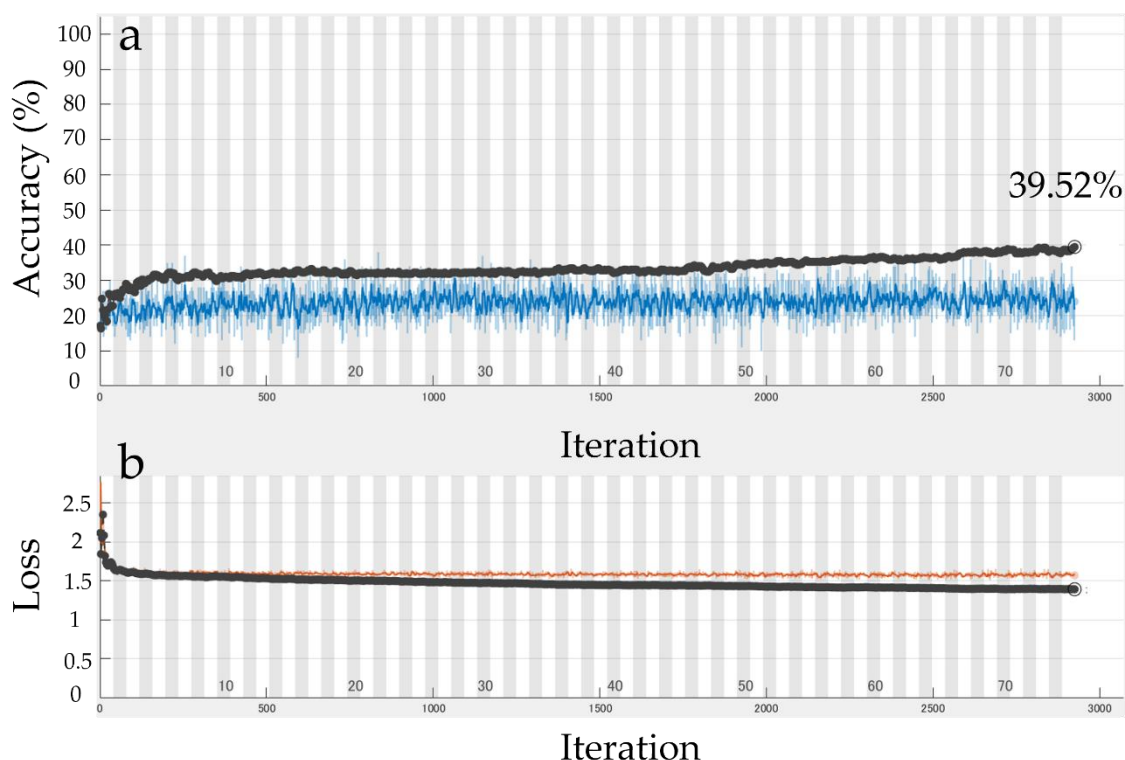


Figure 52 (a) Learning curve of the RGB images using deep learning. (The horizontal axis shows the iteration and the vertical axis shows the accuracy of classification. The blue line shows the accuracy for the learning data set and the black dots represent the accuracy for the verification data set.) (b) The loss function of RGB images using deep learning. (The horizontal axis shows the iteration and the vertical axis shows the loss of classification. The orange line shows the loss for the learning data set and the black dots represent the loss for the verification data set.).

検証時にはドロップアウトを含まないよりロバストなネットワークで損失が計算されたため、トレーニング精度は検証精度より低かった。一方検証時には、ドロップアウトを含まないロバスト性の高いネットワークで損失を計算したため、トレーニング精度が検証精度よりも低くなった。このことから RGB 画像だけで鉱物を識別するのは難しいことが明らかとなった。専門家が鉱物を識別する場合でも、鉱物の表面の情報だけでなく、鉱物の表面をひっかいて筋の色を見たり、光を通して透明度を見たりと、いくつかの方法を組み合わせている。RGB の情報だけで鉱物を識別することは困難であることが示唆された。学習精度の最終反復の結果を Table 9 に示す。RGB 画像から 5 種類の鉱物を分類した場合の精度は 39.52%であった。

Table 9 Result of deep learning for RGB images for the learning data.

	Five types of minerals
Final accuracy	39.52%

また、Figure 53 は 5 種類の鉱物の分類の学習結果の混同行列であり、学習に用いなかったテストデータを用いて分類器の性能を評価したものである。この図は、教師データ、すなわち真の正解データに対して学習モデルが予測した予測ラベルがどの程度正しかったかを示している。右下の灰色で塗られたマスは、上段 38.9%がデータセット全体の正答率、下段 61.1%が誤答率である。緑で塗られたマスはモデルが正解したことを示し、オレンジで塗られたマスは予測に誤りがあったことを示す。緑とオレンジのマスの上段と下段の数字のうち、上段はそのマスで分類されたデータの数、下段はデータセット総数に対する分類されたデータの割合である。白い部分は、それぞれの真のラベルと出力ラベルに対するデータの割合を示す。テストデータが黄銅鉱と予測され、実際に黄銅鉱であった場合の正答率は 50.0%であった。テストデータでは黄銅鉱と予測されたが、実際には別の鉱物であった場合の正答率は 50.0%であった。

Galena	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	NaN% NaN%
Hematite big particle	46 9.3%	31 6.3%	9 1.8%	10 2.0%	5 1.0%	30.7% 69.3%
Hematite small particle	3 0.6%	0 0.0%	66 13.3%	0 0.0%	33 6.7%	64.7% 35.3%
Hematite very small particle	48 9.7%	63 12.7%	24 4.8%	93 18.8%	59 11.9%	32.4% 67.6%
Chalco- pyrite	0 0.0%	1 0.2%	2 0.4%	0 0.0%	3 0.6%	50.0% 50.0%
Output labels	0.0% 100%	32.6% 67.4%	65.3% 34.7%	90.3% 9.7%	3.0% 97.0%	38.9% 61.1%
	Galena	Hematite big particle	Hematite small particle	Hematite very small particle	Chalco- pyrite	True labels

Figure 53 Confusion matrix for the RGB image deep learning results for the test data.

4.4.2. 深層学習を用いたハイパースペクトルデータの解析

5 種類の鉱物の RGB 画像に対して行った深層学習による低精度な分類結果について述べた。ここでは、RGB 画像の代わりにハイパースペクトルデータに対する深層学習の解析結果を示す。ハイパースペクトルデータについては、事前に学習済みのネットワークがなかったため、畳み込み層、正規化層、プーリング層、ソフトマックス層からなるニューラルネットワークをゼロから構築した。ハイパースペクトルデータ用の CNN は、2014 年 ImageNet Large Scale Visual Recognition Challenge (ILSVRC) で高い評価を得た VGG-16 と呼ばれる CNN をベースに作成した[87]。フィルタのサイズを小さくしレイヤーの数

を増やすことで分類の精度を向上させた。分割されたデータセットは、訓練データ、検証データ、テストデータから構成される。学習データは Table 10 に示すようにネットワークの学習に使用され、検証データは学習の出力結果のフィードバックに使用され、テストデータは学習済みモデルのテストに使用された。また、深層学習のパラメータを Table 11 に示す。深層学習では、勾配法を用いてデータを学習した。このうち、ハイパースペクトルデータの最適化には ADAM (Adaptive Moment Estimation) を、学習モデルには SGDM (Stochastic Gradient Descent Moment) を用いた。また、ミニバッチサイズ、最大エポック数、計算時間を Table 11 に示す。

Table 10 Hyperspectral data set.

Hyperspectral data 1 × 1 × 204 pixels	Training data	Validation data	Test data	Total
Galena	770	96	97	963
Chalcopyrite	770	97	97	994
Hematite large particles	765	95	96	956
Hematite small particles	806	101	101	1008
Hematite very small particles	819	103	102	1024

Table 11 Learning options of deep learning. ADAM (adaptive moment estimation).

	Hyperspectral data			RGB images
Learning Options	Two types of minerals	Three different grain sizes of hematite	Five types of minerals	Five types of minerals
Optimizer	ADAM	ADAM	ADAM	SGDM
Mini Batch Size	100	100	100	100
Max Epochs	25	50	100	75
Elapsed time	15 min	61 min	253 min	94 min
Initial Learn Rate	1.00E-04	1.00E-04	1.00E-04	1.00E-04

ハイパースペクトルデータの深層学習では、まず黄銅鉱と方鉛鉱のデータセットを解析して鉱物種を特定できるかどうかを確認し、次に粒径の異なる 3 種類の赤鉄鉱の深層学習解析を行った。そして最終

段階として、深層学習を用いて 5 種類に分類できるかどうかの実験を行った。鉱物種同定の学習曲線を Figure 54 に示す。横軸は反復、縦軸は分類の精度を示している。深層学習では、計算能力を向上させるためにデータセットを複数に分割し、ミニバッチと呼ばれる分割されたデータセットに対して繰り返し学習を行う。反復回数は、これらのパッチに対して何回学習が繰り返されたかを示す。ここで青線が学習データセットの学習精度、黒点が検証データセットの学習精度を示している。深層学習では、ネットワークを学習させる際、学習データを用いてネットワークを学習させ、検証データを用いて検証を行い、ネットワークにフィードバックして重み付けを変更する。

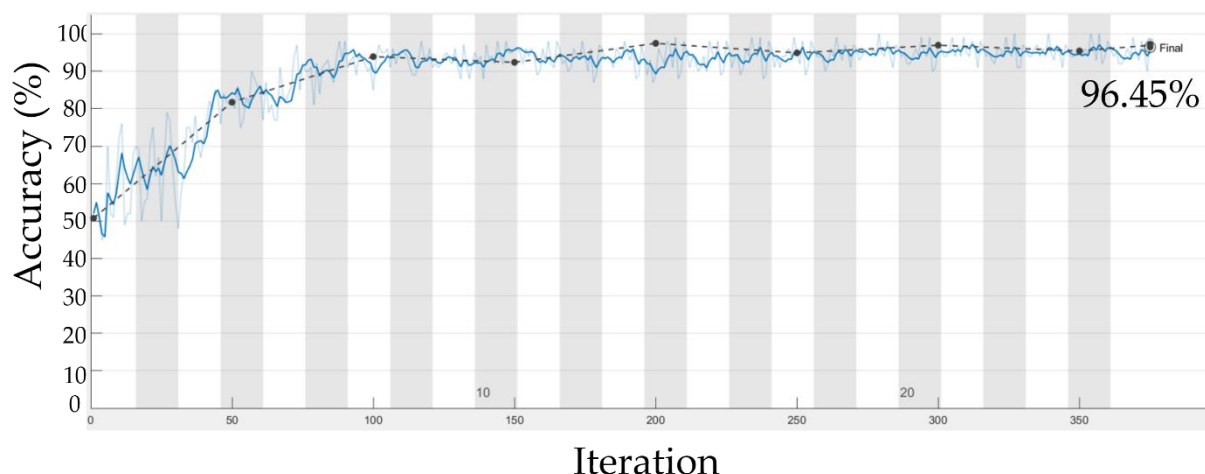


Figure 54 The learning curve of deep learning for hyperspectral data. (The horizontal axis shows the iteration and the vertical axis shows the accuracy of classification. The blue line shows the accuracy for the learning data set and the black dots represent the accuracy for the verification data set).

これを繰り返すことで、ロバスト性の高いネットワークを構築することができる。計算回数が 100 回を超えるまでは精度が急上昇し、計算回数が増えるにつれて分類精度は徐々に 100% に近づき、最終的には 96.45% に達した。学習曲線がジグザグに上昇する傾向にあるのは、学習対象が別のパッチに移動すると学習精度が低下するためである。これらの結果から、ハイパースペクトルデータを深層学習で解析することで 96.45% という高い精度で鉱物の種類を分類できることが確認できた。また Figure 55 に、学習に用いなかったテストデータを用いて分類器の性能を評価した 2 種類の鉱物の分類の学習結果の混同行列を示す。これを見ると、テストデータに対して 90% 以上の高い分類精度が得られていることがわかる。

Galena	96 49.2%	4 2.1%	96.0% 4.0%
Chalco- pyrite	0 0.0%	95 48.7%	100.0% 0.0%
Output labels	100% 0.0%	96.0% 4.0%	97.9% 2.1%
	Galena	Chalco- pyrite	True labels

Figure 55 Confusion matrix of the deep learning results for two types of rocks using test data.

次に、粒径の異なる 3 種類の鉱物試料についてハイパースペクトルデータを取得し、同様に深層学習で分類した。その学習曲線を Figure 56 に示す。同じ鉱物のハイパースペクトルデータを深層学習で解析することで、94.31%という高い精度で鉱物種の同定と同様の分類が可能であった。Figure 57 は、赤鉄鉱の 3 つの異なる粒径の分類の学習結果の混同行列であり学習に用いなかったテストデータを用いて分類器の性能を評価したものである。赤鉄鉱小粒径のテストデータに対する学習モデルの分類精度は 86.1%であったが、全体の分類精度は 92.3%であった。

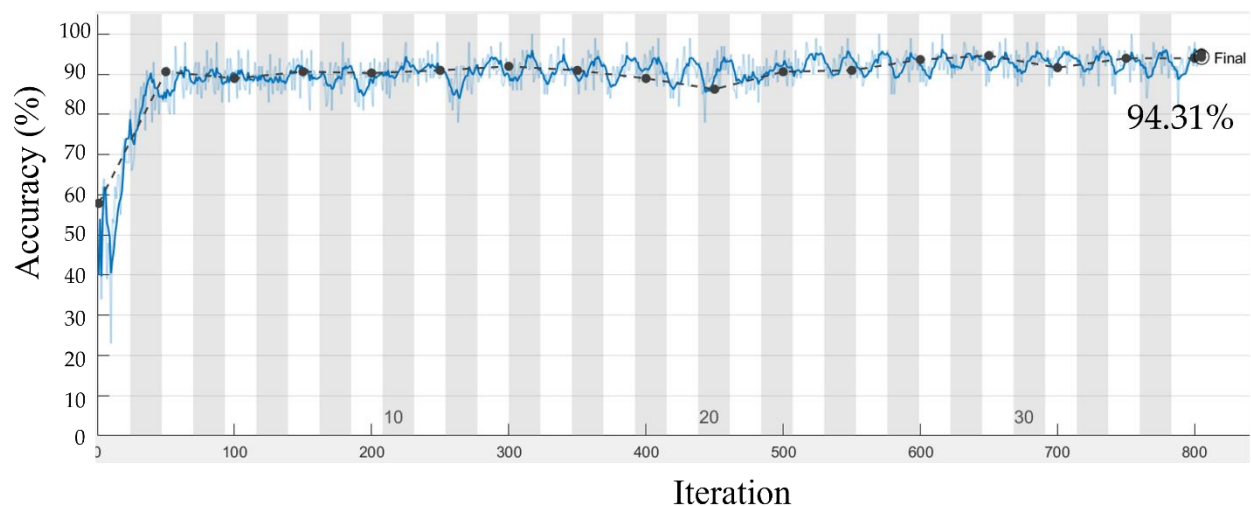


Figure 56 The learning curve of deep learning for three types of minerals. (The horizontal axis shows the iteration and the vertical axis shows the accuracy of classification. The blue line shows the accuracy for the learning data set and the black dots represent the accuracy for the verification data set.).

Hematite big particle	82 27.4%	8 2.7%	0 0.0%	91.1% 8.9%
Hematite small particle	14 4.7%	93 31.1%	1 0.3%	86.1% 13.9%
Hematite very small particle	0 0.0%	0 0.0%	101 33.8%	100% 0.0%
Output labels	85.4% 14.6%	92.1% 7.9%	99.0% 1.0%	92.3% 7.7%
	Hematite big particle	Hematite small particle	Hematite very small particle	True labels

Figure 57 Confusion matrix for three different types of grain sizes of test data.

最後に、黄銅鉱と方鉛鉱だけでなく、赤鉄鉱の3つの異なる粒径のデータを入力して、CNN を使用して鉱物の種類と粒径を識別できるかどうかをテストした。本研究で実施した大粒径、小粒径、極小粒径の3つの粒径区分は、深層学習とハイパースペクトルイメージングの組み合わせによってマイクロオーダーの分類が可能であることを示した。深層学習の汎用性と拡張性は、今後より多くの分類数で実用化するための基本的な示唆を与えている。また、後述する Grad-CAM を用いた逆解析の結果、粒子径によってスペクトル形状に大きな変化が生じることが示され、今後の技術のさらなる高度化に向けた重要な基礎的検討となった。Figure 58 の学習曲線図に示すように、91.33%という高い精度で学習データを分類することができた。この結果からハイパースペクトルデータを深層学習で解析することで鉱物種や粒子径を高精度に分類できることがわかる。RGB 画像を用いた鉱物識別精度が 38.9%と低いことと比較すると、ハイパースペクトルデータは RGB 画像よりも鉱物を一意に識別する波長情報を持っていると考えられる。また、Figure 59 に5種類の鉱物を分類した学習結果の混同行列を示すがこれは学習に用いなかったテストデータを用いて分類器の性能を評価したものである。5種類の鉱物の分類の総合精度は 91.9%であった。

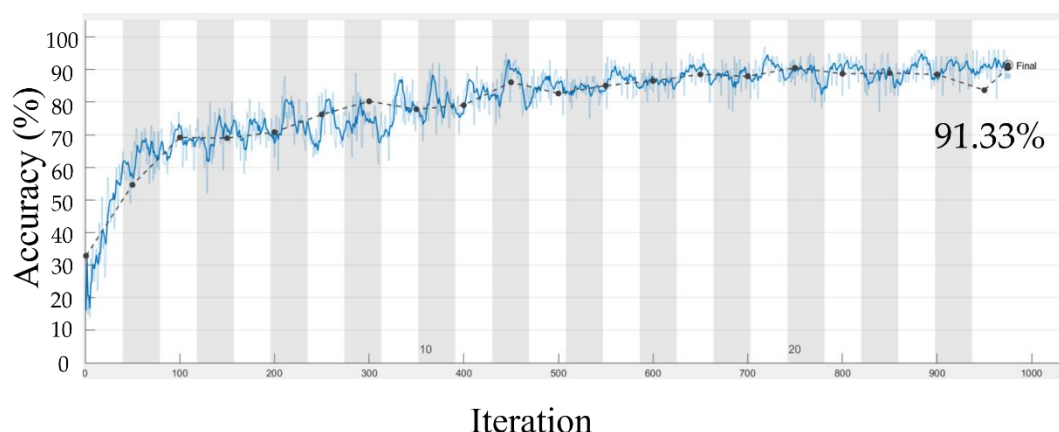


Figure 58 The learning curve of deep learning for five types of minerals. (The horizontal axis shows the iteration and the vertical axis shows the accuracy of classification. The blue line shows the accuracy for the learning data set and the black dots represent the accuracy for the verification data set.).

Galena	94 19.0%	4 0.8%	0 0.0%	0 0.0%	1 0.2%	94.9% 5.1%
Hematite Small	0 0.0%	81 16.4%	13 2.6%	0 0.0%	1 0.2%	85.3% 14.7%
Hematite Very Small	1 0.2%	9 1.8%	80 16.2%	0 0.0%	0 0.0%	88.9% 11.1%
Hematite Big	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	102 20.6%	0 0.0%	100.0% 0.0%
Chalco- pyrite	1 0.2%	2 0.4%	8 1.6%	0 0.0%	97 19.6%	89.8% 10.2%
Output labels	97.9% 2.1%	84.4% 15.6%	79.2% 20.8%	100% 0.0%	98.0% 2.0%	91.9% 8.1%
	Galena	Hematite Small	Hematite Very Small	Hematite big	Chalco- pyrite	True labels

Figure 59 Confusion matrix of the deep learning results.

以上のようにハイパースペクトルデータに対して深層学習を用いることで、鉱物種と粒径の違いを行えるかどうかを3段階に分けて検証を行った。その結果、鉱物のハイパースペクトルデータを深層学習を用いて解析することで、91.9%という高い精度で鉱物種と粒径を判別することに成功した。これにより、選鉱前に鉱物の種類と特性を非破壊で選別することが可能となった。

4.5. 考察

残りの8.1%の誤答データを分析し、誤答の理由を考察した。Figure 60 に鉱物の真のスペクトル(ground

truth data) と誤答のスペクトル (misclassified data) を示す。横軸は波長、縦軸は反射強度を表す。同図 (a) では、方鉛鉱に正しく分類されたスペクトル (実線) と、方鉛鉱以外に誤分類されたスペクトル (破線) が示されている。その他も同様に正しく分類されたスペクトルと誤って分類されたスペクトルを指している。スペクトルの形状はグラントゥルースと誤分類されたデータで異なっている。Figure 61 は CNN の逆解析である Grad-CAM の結果で、CNN が入力データのどこに着目して分類したかを示している。縦軸はカラーマップ強度、横軸は波長を表す。

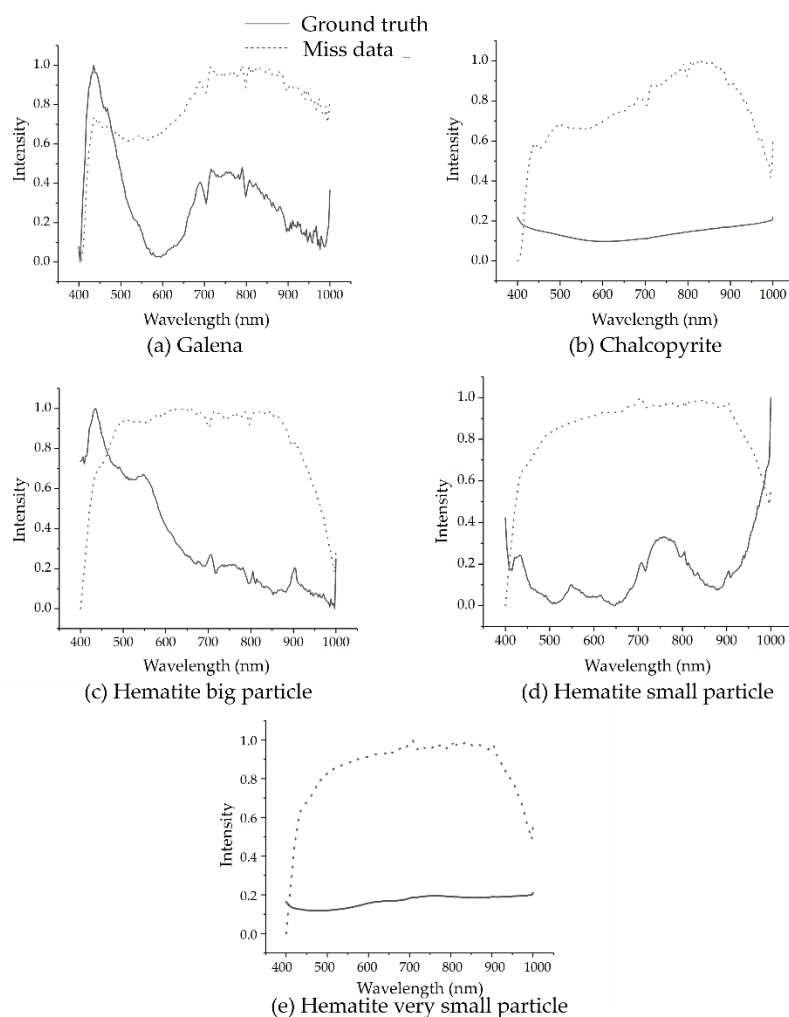


Figure 60 Comparison between the ground truth spectrum and misclassified spectrum of (a) galena, (b) chalcopyrite, (c) hematite large particles, (d) hematite small particles, and (e) hematite very small particles. The solid line shows the ground true spectrum and the broken line shows.

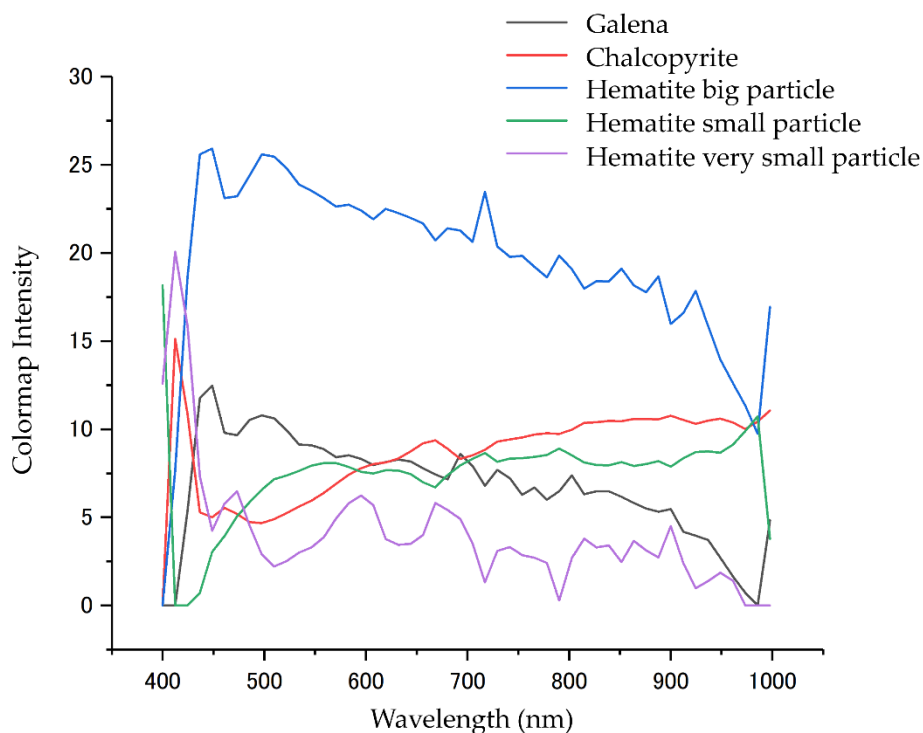


Figure 61 Results of the Grad-CAM analysis for the deep learning results.

Figure 60 のグラントゥールスと誤分類されたデータの間にはスペクトル形状の違いがあるが、Grad-CAM を使用することで、スペクトルのどの波長領域が誤分類の影響を受けたかを示すことができる。縦軸のコロマップ強度が高ければ高いほど、この波長帯域の影響が分類において大きかったことを示し、コロマップ強度が低ければ低いほど、この波長帯域のデータは CNN を用いた分類において重要でなかったことを示す。両図を比較すると、Grad-CAM のカラーマップ強度が高い波長域では、グラントゥールスのスペクトルと不正解のスペクトルの間に誤差がある。ハイパースペクトル鉱物学的には、鉱物種の特徴的なスペクトルは赤外などの高波長域に現れるが、Grad-CAM の解析結果では短波長域にも鉱物を識別する特異的なスペクトルが現れることがわかった。黄銅鉱については、450 nm 付近でグラントゥールスと誤分類データの間に大きな差があり、Grad-CAM はこれが重要であることを示している。粒径の異なる 3 種類の赤鉄鉱については、誤分類データ全体と正しいデータとの間に大きな形状の違いがあり、特に Grad-CAM が指し示す波長の両端では識別に大きな影響を与えている。3 種類の赤鉄鉱については、グループ内で最大の誤分類が波長の両端の違いが微妙であったことを示している。

本システムで取得したハイパースペクトルデータの両端は分光性の観点から高感度であるため、取り扱いが難しい。今後、システムティックなシステムを構築するためにはデータの拡充が必要である。このような誤ったデータからの情報を CNN にフィードバックするシステムの構築が必要となるが、本システムだけでも 5 種類の鉱物について 90% 以上の高い分類精度を示しており、実用上十分な精度を有している。

本章では、深層学習とハイパースペクトル画像を用いた鉱物種の同定実験について述べた。深層学習を用いることで大量のデータを高速に処理することができ、鉱物の入力データから鉱物種を判別する特徴

量を自動的に抽出・学習することができる。専門家が鉱物を鑑定する場合、鉱物の色や透明度に着目して鑑定を行うが、深層学習を用いることで、鉱物を分類する際に注目すべき特徴点を自動的に検出することができる。専門家による鑑別では肉眼情報が大きな手がかりとなるため RGB 画像に対して深層学習を行い鉱物の鑑別を行ったが分類精度は 32.66%であり、RGB 画像だけでは鑑別が困難であることがわかった。

このように、専門家が肉眼で識別する際には、鉱物表面の色や透明度だけでなく比重や硬度などの複合的な視点で識別するため、RGB 画像だけでは不十分であると考えた。そこで、RGB 画像よりも広域・高解像度のハイパースペクトルデータを取得し、これを深層学習を用いて解析した。その結果、鉱物種の分類精度は 91.9%と RGB 画像を用いた場合よりも良好であった。RGB 画像を用いた場合と比較して、判別精度が大幅に向上した。このことから、鉱物種を定義する波長帯域は RGB 画像で得られる波長域外で得られることが示唆され、ハイパースペクトルデータには鉱物の特徴的な光学特性が含まれていることが提案された。

4.6. 深層学習を用いた鉱物同定モデルに関する結論

ハイパースペクトルイメージングでは、可視光波長域から近赤外域までの情報を含む高解像度のスペクトルデータを得ることができる。深層学習を用いることで、ハイパースペクトルデータの特徴を抽出・学習し、各鉱物に固有のスペクトルパターンを同定・解析することができる。実験では、方鉛鉱、黄銅鉱、粒子の大きい赤鉄鉱（0.5～1.0cm）、粒子の小さい赤鉄鉱（100 μm 未満）、粒子の非常に小さい赤鉄鉱（20 μm 未満）の 5 種類の鉱物を用意し、ハイパースペクトル画像と深層学習を用いて分類タスクを実施した。

深層学習を用いた鉱物の種類と粒径のハイパースペクトルデータ分類タスクでは、精度は 91.9%と高精度な分類結果が得られた。一方、RGB 画像の精度は 39.52%でありハイパースペクトルデータを用いた場合と比較して精度の低い分類結果となった。誤分類されたデータについては、Grad-CAM を用いた CNN 出力の逆解析の結果を議論した。解析の結果、誤分類の原因は特定の波長領域におけるグラントゥールースと誤分類データの差異であることが判明した。この解析結果を CNN に反映させることで、よりロバストなネットワークを構築することができる。

この自動鉱物識別システムは、鉱物の種類だけでなく、鉱物の結晶の大きさも同時に判定することができる。深層学習を採用することで、大量のデータを高速に処理することができる。本システムを採掘後の鉱物に適用することで、鉱物の種類や特徴を判別し、その後の選鉱工程で適切な選鉱手段を選択することが可能となる。以上のことから深層学習とハイパースペクトル画像処理を組み合わせた手法は、鉱物の種類や特性を識別するのに有効でありこれらの判断が高精度・高速・低コストで可能であることがわかった。

5. ハイパースペクトルイメージングと深層学習を用いた次元削減・判定根拠可視化アルゴリズムの開発：硫砒銅鉱を用いたケーススタディ

5.1. 本章の背景

鉱物資源は人類の発展にとって必要不可欠なものであるが、それらは極めて長い地球の地質活動の結果生じる枯渇性の資源であり持続可能な資源開発が求められる[117], [118]。しかしながら、鉱山開発に伴う森林資源の伐採による動植物の生息域の破壊や、鉱山から排出される汚水・ガスによる水質汚濁・土壤汚染、大気汚染など、資源の有限性を無視した開発が多く行われている。特に、チリ国内で多くを産出する銅鉱石においては、品位の高い鉱石は掘りつくされ、現在人体に有害な物質であるヒ素を多く含む品位の低い鉱石のみを産出しその精製過程におけるヒ素汚染が大きな問題となっている。低品位の鉱石に関しては、選鉱や製錬などといった処理過程において有用鉱石の濃度を高めるような処理を行うが、それら処理過程において生じる排水や排ガスにヒ素が含まれていることから鉱山周辺地域への環境破壊・健康被害が懸念されている。微量であっても長期間ヒ素の混入した水を飲用し続けることで、皮膚疾患や発がん、流産や幼児の発育障害など深刻な健康被害をもたらすことが広く知られている。それらのことから、ヒ素を多く含む鉱石の処理が選鉱・製錬過程において大きな経済的負担となっている。さらに、世界的な環境意識の高まりとともに近年その取得が開発主体に求められている、地域住民の鉱山開発に対しての社会的合意である SLO (Social License to Operate, 以下 SLO)の取得が今後困難化することが予想される。持続可能な資源開発を行うためには、それらヒ素を含有する低品位鉱石処理に対して、高度な金属回収技術の開発が必要不可欠であり[56], [74], [75], [92]、センサベースの鉱石選別 (Sensor Based Ore Sorting, 以下 SBOS)がそれを実現する[71], [72], [81], [119], [120], [121]。

SBOS の導入は、カットオフ品位を低下させ鉱山寿命を延長させるほか、後の選鉱過程で生じる尾鉱を減少させることで環境負荷を低減し、SLO の取得が容易になることが考えられる。さらに、非破壊で分類された尾鉱は地盤工学的に安定しており、また、含水率が低いため保管が容易である。これらのことから、SBOS の導入は鉱物処理過程における経済性・生産性の両方に影響を与えることになる[81]。SBOS は主に、ダイヤモンドや工業用鉱物の選別のため X 線リソグラフィー (X-ray Lithography, 以下 XRL) ベースの選別機が広く用いられてきたが、近年 Table 12 に示すようにダイヤモンド以外の鉱物選別について様々な手法が開発され始めてきた[81]。

本研究に関わる先行研究として、深層学習をエキスパートシステムとして採用した、簡便かつ非破壊の SBOS の開発が実施された[56]。センサとして可視光領域から近赤外線までの波長データを取得できるハイパースペクトルイメージングを使用している。しかしながら、ハイパースペクトルデータには 204 もの広波長領域の詳細なデータが含有されている。一方で、そのデータ処理に大量の計算資源が必要な他、ハイパースペクトルカメラ自体が高価であることが操業現場への導入の際の障壁となった。そこで、本研究では、ヒ素含有鉱物のハイパースペクトルデータについて、機械学習の手法である NCA と CNN を特徴抽出器として用いて解析することで鉱石粉体同定に必要な数波長帯を特定した。その後、それら必要最小限の波長帯のみを含有するデータについて、機械学習を用いて鉱石粉体同定を実施した。数波長帯のみのデータを用いた鉱石粉体同定が可能になることで、ハイパースペクトルカメラと比べ、より安価・データ取得の解析が高速であるマルチスペクトルカメラを用いての鉱石粉体同定が可能となることが期待される。

Table 12 Detection systems for sensor-based sorters and exemplary applications in mining.

Detection Type	Material Property	Mineral Application
Radiometric (RM)	Natural gamma radiation	Uranium, precious metals
X-ray transmission (XTR)	X-ray attenuation coefficient	Base / precious metals, coal, diamonds, etc.
X-ray fluorescence (WRF)	Elemental composition	Base / precious metals
X-ray fluorescence (XRL)	Visible luminescence under X-rays	Diamonds
Visual spectrometry (VIS)	Reflection/absorption of visible radiation	Metals, industrial minerals gem stone
Color (COLOR)	Color, reflection, brightness, transparency	Base/precious metals, industrial minerals, gem stones
Photometric (PM)	Monochromatic reflection, absorption	Industrial minerals, gem stones
Near-infrared spectrometry (NIR)	Reflection/absorption of NIR radiation	Base metals, industrial minerals
Thermal infrared (TIR)	Microwave excitation and thermal infrared detection	Base Metals, Precious Metals
Laser triangulation (3D)	Hull detection (shape and form)	Base Metals, Precious Metals, ferrous metals
Prompt gamma neutron activation analysis (PGNAA)	Absorption and emission of prompt gamma rays	Ferrous metals
Laser induced breakdown spectrometry (LIBS)	Evaporation of matter	Industrial minerals
Laser induced fluorescence (LIF)	Absorption of laser light and spontaneous emission of light	Industrial minerals

5.1.1. 既往研究

現状鉍石種の同定には、肉眼での観察のほかに、XRD や AAS・ICP といった大型の測定機器を用いた手法が存在するが[76], [81], [122]、主に選鉍などの実操業で運用する上で解析速度、利便性・経済性などの観点から現実的でない。そこで、選鉍に適した形としての鉍物同定として SBOS が開発され、70 年以上前からダイヤモンドの鉍石選別として、また 1990 年代後半ごろからは、カルサイトやマグネサイト、石英、岩塩などの工業用鉍物のみを対象に導入が進んだ[81]。近年では Table 1 に示したように、パイロットプラント規模の状態から脱却し、より大容量の生産規模に耐えうる装置の設置が増加している[81]。SBOS の開発・導入が進んできた一方で、ハイパースペクトルデータを用いた鉍石分類の事例は数少な

い。鉱石のハイパースペクトルデータをパターンマッチングを使用して同定を行うものや、ハイパースペクトルデータの解析に深層学習を用いた研究が存在する[56], [123], [124], [125], [126]。その他にもハイパースペクトルデータの解析に深層学習を用いる研究は存在するが、リモートセンシングの用途に限られたものが多い[82], [85], [127], [128], [129]。それらは、鉱石同定の精度において優れた性能を発揮する一方で、ハイパースペクトルカメラ自体が高価であること、またデータ取得に時間を要することから、即応性が求められる実際の操業現場への応用の障壁となってきた。

本章では、鉱石粉体のハイパースペクトルデータを、ハイパースペクトルカメラを用いて取得し、深層学習（深層学習）によってそれらを解析することで、鉱石粉体の同定を行った。深層学習を使用することで、従来の機械学習や複数の機械学習モデルを組み合わせた同定手法と比べ、より汎用性の高く、簡易な学習モデルの作成が可能となる。深層学習による解析を行った後、訓練後の学習モデルの解析を実施することで、広波長領域のハイパースペクトルデータの中から、鉱石粉体の同定に最も影響を及ぼした波長帯を特定・抽出した。さらに、深層学習以外に加えて、機械学習の一種である近傍成分分析（Neighborhood Components Analysis、以下 NCA）を用いて同様にハイパースペクトルデータの特徴抽出を実施し、深層学習で抽出された波長帯と組み合わせて、それらを機械学習の手法を用いて鉱石粉体同定を実施できるのかを実験した。ハイパースペクトルデータよりも少ない波長数で鉱石粉体同定を行うことで、より安価なマルチスペクトルカメラでのデータ取得が可能になるほか、データ解析速度が向上することが望まれる。

5.2. 方法

5.2.1. NCA

教師あり学習の一つに分類され、分類したい未知のデータについて、確率的に選ばれたある点からの距離尺度が最も近いクラスについてコスト関数から求める手法である[130]。

5.2.2. ハイパースペクトルデータの取得方法

ハイパースペクトルカメラとは、通常の RGB カメラとは異なり、x、y 方向の 2 次元の平面データに加え、100 以上に分光された z 軸方向へのバンド帯を持つ波長データの取得可能なカメラである。本研究で使用した Spectral Imaging 社の Specim IQ は、400nm~1,000 nm まで、可視光領域から近赤外線領域の一部の光の波長を 204 個の波長帯に分光することが可能で、およそ 3 nm 波長ごとの詳細なデータ取得が可能である。鉱石それぞれにおいて、固有の波長パターンがあると考えられる。それら鉱石粉体の波長データをハイパースペクトルカメラを用いて取得し、取得されたデータについて深層学習を行うことで鉱石粉体波長データの解析を実施した。

5.2.3. 実験方法

撮影実験の様子および概念を Figure 62 と Figure 63 に示す。光源が干渉しないよう、暗室において実験を実施し、さらに、試料周辺に影が生じないよう、対象鉱石粉体をハロゲンライトでカメラ左右後面の 3 方向から照らし、光源とした。ハロゲンライトを用いることによって、今回使用したカメラが取得する 400~1,000 nm までの波長帯領域を一様に照らすことができる。ハロゲンライトは時間の経過とともに、フィラメント部分が非常に高温に熱せられ、ハロゲンの波長ピークは高いほうに遷移していくが、事前に行った実験から数時間程度の使用においては取得されるハイパースペクトルデータに対しての大きな影響は見られなかったためその影響は無視した。光源の照度に関しては、照度計で毎回の撮影ごとに計

測した。しかしながら、カメラ側で露光時間の調節が自動で行われることなどや白板を用いた補正が行われることから、その影響についても事前に実施した解析試験からその影響を無視した。

試料の撮影前に白板を撮影することで、その反射強度を基準とし、後の撮影で取得される波長データは白板の反射強度に対する相対反射強度として取得される。ハイパースペクトルカメラによる一回のデータ取得は、露光時間によるがおよそ一分以内に終了し、撮影されたハイパースペクトルデータは計算機上に波長の波長データとして示すことができる。



Figure 62 Scenery of experiment.

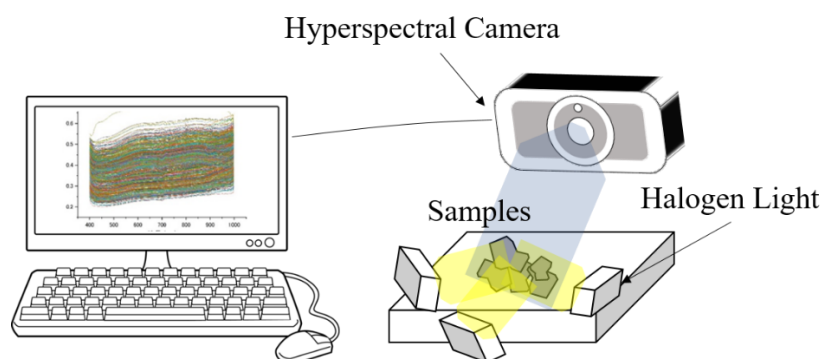


Figure 63 Outline of data acquisition.

ハイパースペクトルカメラ一回の撮影によって取得されるデータは縦・横の二次平面に加え、波長方向への奥行きを持つデータキューブと呼ばれる 3 次元データとして表される。縦 512 ピクセル、横 512 ピクセル、そして奥行き部分に当たる波長帯が 204 ピクセル存在する。本研究では、縦横のピクセルを 16 等分して、縦横それぞれ 32 ピクセル、奥行き 204 ピクセルのデータキューブを、一度の撮影につき 256 個作成した。そして、それら分割されたデータキューブそれぞれに対して、縦横 1 ピクセルになるように平均し、縦横 1 ピクセル、奥行き 204 ピクセルの Figure 64 に示すデータセットを用意した。

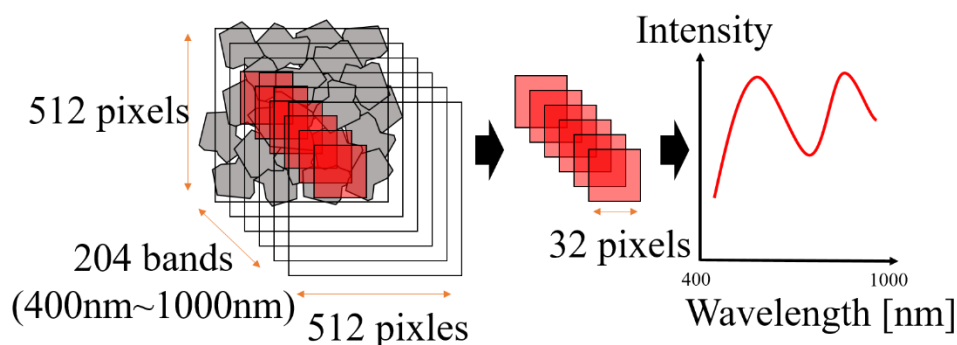


Figure 64 Pre-processing of hyperspectral data.

5.2.4. 実験対象

ヒ素・銅・鉄含有量がそれぞれ異なる粉末体の試料を 14 個用意し、それぞれを CNN によって学習させ同定できるかを実験した。それぞれの試料であるが、ヒ素含有量が比較的高いグループ群を A、中程度のものをグループ B、ヒ素があまり含まれていないものをグループ C としてそれぞれ Figure 65 に表示している。それぞれのグループについては、同一の鉱石試料（硫砒銅鉱を含有）由来の粉末について、重量比単位において、グループ内で同一含有量になるように石英粉末で希釈を行った。

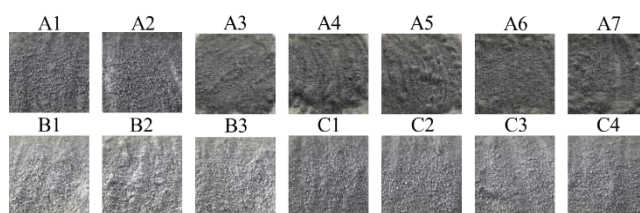


Figure 65 RGB images of samples.

各試料については、ICP 発光分光分析装置（SII 社、SPS-5510）を用いて、それらサンプルの化学組成および含まれる硫砒銅鉱の品位を測定し Table 13 に示した。ICP では試料体にプラズマのエネルギーを与えることで、原子を励起させ、励起状態の原子がもとのエネルギー準位に戻る際のエネルギー放出の際を測定し元素を特定する。ICP による分析の結果から、三つのグループ群の中で一番ヒ素含有量が高いグループ A の鉱石においても、鉱石中に含まれているヒ素含有量は 1% に満たない。また、ヒ素含有量に比べて銅品位は 10 倍以上存在するなど、ハイパースペクトルデータにおけるヒ素以外の元素の要素が、特に、これら元素の他に石英成分が大勢を占めていることを考慮する必要があると考えられる。さらに、含有される元素量についても、グループ間において相関関係は認められるもののグループ内において差異が生じているため、その影響についても考慮する必要がある。加えて、取得されるハイパースペクトルデータは試料表面の反射強度を測定するため、鉱物組成による影響も生じる。それら試料について、ハイパースペクトルカメラを用いてハイパースペクトルデータを取得したのちに、深層学習を用いた解析・同定を行った。最後に、それら機械学習を用いた同定根拠について、鉱石粉体同定が可能であることを検証した。

Table 13 Chemical composition of target minerals and contents of enargite.

Samp.name	As [wt%]	Cu [wt%]	Fe [wt%]	Enargite [%]
A1	0.30	5.27	2.29	1.58
A2	0.31	7.18	2.41	1.63
A3	0.27	6.01	1.45	1.41
A4	0.24	5.56	1.04	1.26
A5	0.26	5.40	1.08	1.38
A6	0.27	5.38	0.98	1.39
A7	0.24	4.91	1.00	1.27
B1	0.10	2.32	0.88	0.53
B2	0.12	1.75	0.80	0.64
B3	0.09	2.17	1.22	0.46
C1	0.07	0.90	0.65	0.36
C2	0.05	0.93	0.63	0.25
C3	0.08	0.81	0.60	0.41
C4	0.02	0.63	0.61	0.13

5.3. 実験結果

ハイパースペクトルカメラによって得られたテストサンプル ABC のハイパースペクトルデータ (計 14 種類) を Figure 66 に示す。横軸が波長 (nm)、縦軸が反射強度を表し、一本一本の線が撮影サンプルから得られたハイパースペクトルデータを示している。反射強度は、事前に取得された白板の反射強度を 1 とし、それに対する相対強度となっている。各ハイパースペクトル線は RGB 画像 16×16 ピクセルに含まれるデータの平均値に相当する。A1 から C4 まで、種類ごとに色を変えて表示している。全体の傾向として、U 字を描くような波長の形状が得られており、U 字の底の部分では若干の右肩上がりを示している。700 nm、800 nm 付近にピークが見られる特徴的な形となっている。その他の波長帯においても人間の目視では確認しきれない微細な反射強度の上下への揺れを多数示している。また、暗色を呈する反射強度が低い硫砒銅鉱含有鉱石を反射強度が高い白色の石英で希釈していったため、石英含有量が高くなるほど全体の反射強度も同様に上昇している。

各試料によって、ピークの度合いや波長の形状においてスペクトル強度などによる差はあるものの、基本的な波長の形状は変化していないことがわかる。これら取得されたデータを、今度は CNN に入力を行うことによって鉱石粉体データの学習を行っていく。さらに学習済みの CNN、そして NCA による解析を行うことで同定に重要な波長領域の特定も行う。

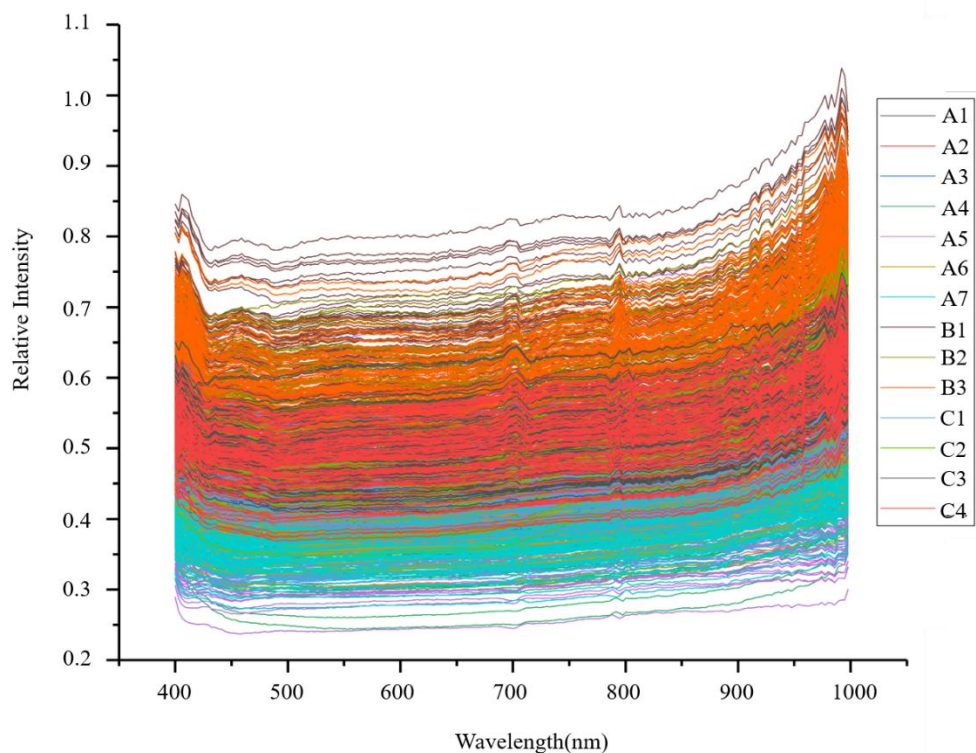


Figure 66 Spectrum data of test data ABC.

5.4. 深層学習による学習モデルの作成

5.4.1. ハイパースペクトルデータに対する深層学習

ハイパースペクトルデータの前処理を実施したのちに、前処理後のハイパースペクトルデータを学習用とテスト用に分割した。全部で 10,751 個のハイパースペクトルデータについて、そのうちの 9 割を学習用データとし、残りの一割のデータを学習に用いずにネットワーク性能を検証するためのテストデータとした。その後、CNN を用いた学習モデルの作成・学習を行い、学習済みのネットワークについてテストデータを用いて検証を実施した。モデルの学習に用いられる 9,676 個のハイパースペクトルデータについては、ランダムに 300 個ずつが抽出し学習を行うミニバッチ学習が実施された。ミニバッチ学習を行うことで、全データを用いて学習を実施するバッチ学習と比べ、計算速度を向上させることが可能となる。Table 14 の学習結果に示すように、ハイパースペクトルデータを使用した学習モデルは、学習データについては 90.45% の精度を示した。さらに、学習に用いていないテストデータによる学習済みネットワークの検証においても同様に 90% 以上の同定精度を示した。14 種類のヒ素含有量が異なる粉末試料について、同グループ内外含めて、90% 以上の高精度で同定を実施できることを示した。特に Figure 67 に示すようにグループ内における元素の差異は小さく、それらの違いについても同定を行えることを示した。

Table 14 Result of deep learning.

	Number	Accuracy [%]
Learning	9,676	90.45
Test	1,075	90.1

Confusion Matrix

	A1	A2	A3	A4	A5	A6	A7	B1	B2	B3	C1	C2	C3	C4	
A1	77 7.1%	26 2.4%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	74.8% 25.2%
A2	0 0.0%	51 4.7%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	100% 0.0%
A3	0 0.0%	0 0.0%	77 7.1%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	100% 0.0%
A4	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	60 5.6%	2 0.2%	1 0.1%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	95.2% 4.8%
A5	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	12 1.1%	70 6.5%	2 0.2%	1 0.1%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	82.4% 17.6%
A6	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	4 0.4%	5 0.5%	70 6.5%	5 0.5%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	83.3% 16.7%
A7	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	1 0.1%	0 0.0%	4 0.4%	71 6.6%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	93.4% 6.6%
B1	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	76 7.1%	3 0.3%	1 0.1%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	95.0% 5.0%
B2	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	57 5.3%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	100% 0.0%
B3	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	1 0.1%	17 1.6%	76 7.1%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	80.9% 19.1%
C1	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	74 6.9%	4 0.4%	1 0.1%	0 0.0%	93.7% 6.3%
C2	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	2 0.2%	66 6.1%	0 0.0%	95.7% 4.3%
C3	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	2 0.2%	68 6.3%	1 0.1%	95.8% 4.2%
C4	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	1 0.1%	5 0.5%	8 0.7%	75 7.0%	84.3% 15.7%
	100% 0.0%	66.2% 33.8%	100% 0.0%	77.9% 22.1%	90.9% 9.1%	90.9% 9.1%	92.2% 7.8%	98.7% 1.3%	74.0% 26.0%	98.7% 1.3%	96.1% 3.9%	85.7% 14.3%	88.3% 11.7%	97.4% 2.6%	89.8% 10.2%
	A1	A2	A3	A4	A5	A6	A7	B1	B2	B3	C1	C2	C3	C4	

Target Class

Figure 67 Confusion matrix of deep learning result.

5.4.2. 混合行列について

Figure 67 には、テストデータ A1～C4 までの学習結果の混合行列を表示した。5.4.1 において、ハイパースペクトルデータの中で学習データと検証データを用いて鉱石粉体を分類する学習モデルを作成したが、その学習モデルの性能を評価するために、混合行列によって性能を評価した。ここでは、テストデー

タ A1～C4 までの学習結果の混合行列を表示した。グループ A はヒ素含有量が比較的高いグループであり、グループ B は中程度のヒ素含有量、そしてグループ C は低濃度のヒ素含有量となっており、同じグループの中の化学組成は類似している。この混合行列は、真の正解データである教師データに対して、学習モデルが予測した分類結果となる予測クラスがどの程度正答しているかを表している。混合行列において、行は予測されたクラス、列は真のクラスとなる。対角線上のマス目は正しく分類されたデータを表す。それ以外のマス目は誤分類したデータを表している。各マス目には予測データ数と、全てのテストデータに対する割合の両方が表示されている。右下の灰色で塗られたマス目、上段 90.1%が全体のデータセットに対する正答率を示し、下段 9.9%が誤答率を示す。緑色で塗られたマス目は学習モデルが正答したものを指し示し、橙色で塗られたマス目は、誤答したデータについて示している。この混合行列を見ると、学習モデルがテストデータをどのように分類したのかを可視化することができる。

例えば、全体 78 個のデータのうち A1 と予測し、実際 A1 だったものが 68 個あるが、一方、A1 と予測したが A2 だったものが 10 個あることがわかる。また、B2 と正確に判別できたものが全体 82 個あるうちの 72 個あったが、間違って B3 と判別してしまったものが 10 個あることがわかる。このように、同じ ABC グループの中での判別が困難であることがこの混合行列から読み取ることができる。しかしながら、グループをまたぐ同定においては同定ミスが比較的小数であり、この CNN を用いた学習モデルは高い精度でハイパースペクトルデータからヒ素を含有する鉱石粉体のヒ素含有量に基づく分類を行える可能性を示唆している。

5.5. CNN と NCA による特徴抽出

5.5.1. CNN による特徴抽出

CNN による鉱石のハイパースペクトルデータの学習を行った後、学習済みのネットワークについて解析を行うことで特徴抽出を実施した。すべての波長データを用いて鉱石粉体同定を行うのではなく、一部のデータのみで同定を行うことで、データの解析速度の向上につながる。さらに、マルチスペクトルカメラをセンサとして使用することが可能となり、より安価な SBOS の構築につながる。CNN は、Figure 68 に示すように、画像の局所的な特徴抽出を担う畳み込み層と、局所ごとに特徴をまとめあげるプーリング層を繰り返した構造となっている。CNN では、入力に近い層から識別層に近づくにつれ、徐々に低次の視覚的特徴からデータセットに特化した意味的な特徴に構造化されることが知られている [27]。本研究では、Table 15 に示すようなネットワークを用いて学習を行った。このネットワークについて経験的に、最後の正則化線形ユニット (ReLU) 層について、MATLAB の関数 activations を用いその層におけるネットワーク活性化を計算し、各波長帯が出力に及ぼした重みを算出した。CNN の深い層には、初期の層の低レベルの特徴を使用して構築されたより高レベルの特徴が含まれている。関数 activations では、その特徴を抽出することが可能であり、本研究においては特定の同定に重要な影響を与えた波長帯域を特定することができる [131]。

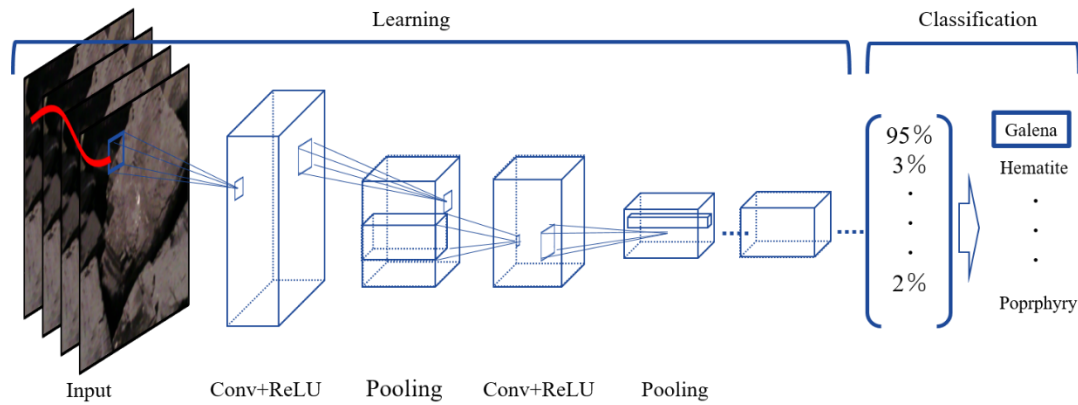


Figure 68 Structure of CNN.

Table 15 Layer information.

Layer	Size	Stri de	Padd ing	Layer	Size	Stri de	Padd ing
ImageInputLayer	[1, 204]			Convolution2dLayer	[1, 3]	1	[0, 1]
Convolution2dLayer	[1, 3]	1	[0, 1]	Convolution2dLayer	[1, 3]	1	[0, 1]
Convolution2dLayer	[1, 3]	1	[0, 1]	BatchNormalizationLayer			
BatchNormalizationLayer				ReluLayer			
ReluLayer				MaxPooling2dLayer	[1, 2]	[1, 2]	
MaxPooling2dLayer	[1, 2]	[0, 1]		FullyConnectedLayer			
Convolution2dLayer	[1, 3]	1	[0, 1]	FullyConnectedLayer			
Convolution2dLayer	[1, 3]	1	[0, 1]	FullyConnectedLayer			
BatchNormalizationLayer				SoftmaxLayer			
ReluLayer				ClassificationLayer			

MaxPoolin g2dLayer	[1, 2]	[1, 2]					
-----------------------	--------	-----------	--	--	--	--	--

関数 activations による解析結果から各波長帯における試料 A1～C4 までのそれぞれの重みを Figure 69 に示した。さらに、それら 14 種類の試料の重みについて、全体における重みを統合するために、各波長帯での和を算出し Figure 70 に示した。Figure 8 から、試料 A1～C4 までの内、鉱石粉体同定に最も影響を与えた上位 5 つの重みがある波長帯として、436、712、916、952、964 (nm) を抽出した。その後、それら少数の波長帯のみを含むデータを用いて機械学習による鉱石粉体同定を実施した。

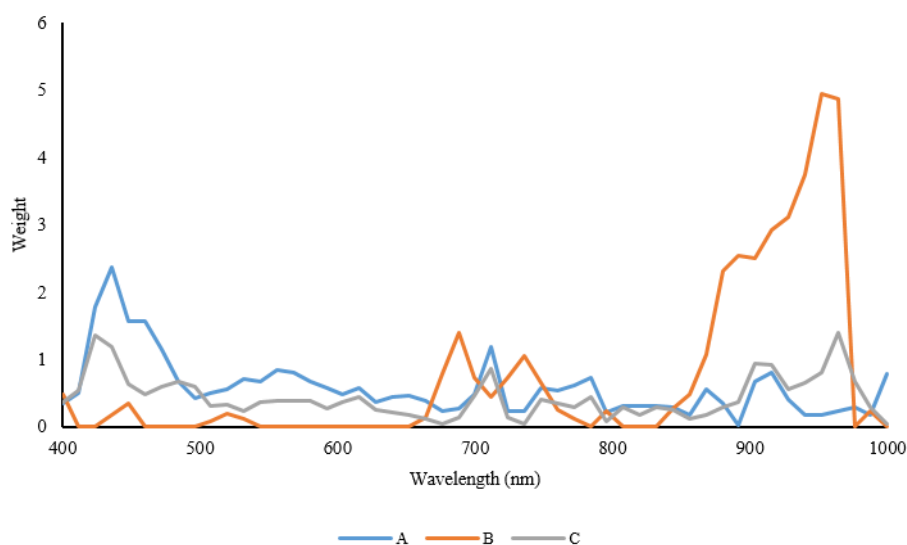


Figure 69 Weights of each wavelength regions of spectrum A1 to C4.

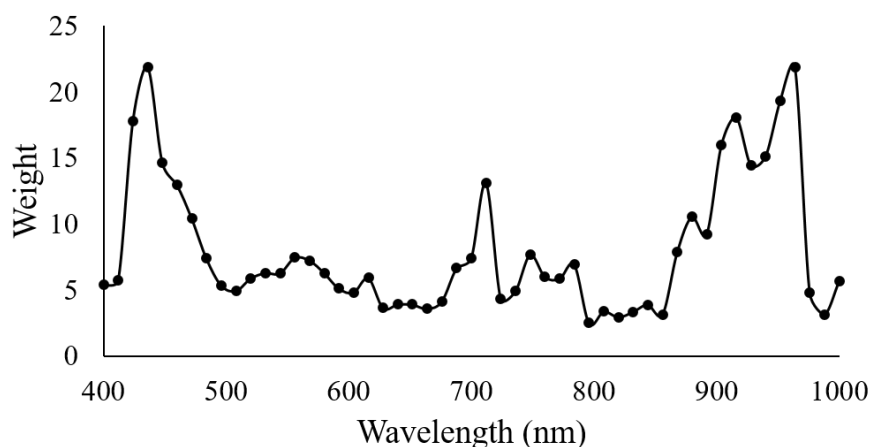


Figure 70 Sum of weight.

5.5.2. NCA による特徴抽出

NCA は機械学習の一つであり、クラスタリングの他に特徴抽出の手法としても用いられる。データ集合について、ノンパラメトリックな処理が可能であり、正規分布などパラメトリックな仮定を必要とし

ない。データの学習方法には、Leave-One-Out（以下 LOO）と呼ばれるデータ区分方法を用いる[130]。LOO とは、 n 個のデータ群から 1 つの事例だけを抜き出してテストデータとし、残りを学習データとし、これについて全てのデータが一回ずつテストデータとなるよう検証を繰り返す方法である。NCA では、この LOO 確率について、次式に示されるように、重み w を関数として持つ、距離関数を確率 p として設定しそれを最適化するように計算を行った[132]。

$$F(w) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n p_i$$

ここで、 $F(w)$ の右辺を変形すると、次式のように示され、

$$F(w) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n F_i(w)$$

重みベクトル w を求めるために、 $f(w) = -F(w)$ および $f_i(w) = -F_i(w)$ とすると、以下次式のように求められる。重みベクトル w について、ハイパースペクトルデータを NCA で解析することによって取得し、ヒ素含有量同定に重要である波長帯の特定を行った。

$$\hat{w} = \operatorname{argmin} f(w) = \operatorname{argmin} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f_i(w)$$

本研究では、これらに示される計算式について、MATLAB の関数 `fscnca` を用いて解析を行った。関数 `fscnca` を用いることで、入力されたハイパースペクトルデータについて NCA を実施し、鉱石粉体同定の際の各波長帯の重要度である重みを Figure 71 に示すように算出した。縦軸が重みを示し、横軸が 1～204 までの波長帯区分を示している。波長帯 1 が 400 nm の波長帯を、また、波長帯 204 が 1,000 nm における波長帯に相当する。この解析結果から、204 ある波長帯のほとんどの重みが 0 に近く、十数個ほどのデータのみが重要な波長帯であることが示された。`fscnca` によって重みを算出したのち、さらに、その中でも重みが最も高い 5 つの波長帯を特定した。NCA による全波長帯の解析を実施することで、204 ある波長帯全てを用いた鉱石粉体同定よりもさらに効率的な鉱石粉体同定につなげることが可能となる。それら抽出された 5 つの波長帯のみを用いて次に、機械学習による解析によって鉱物同定が可能であるかを実験した。

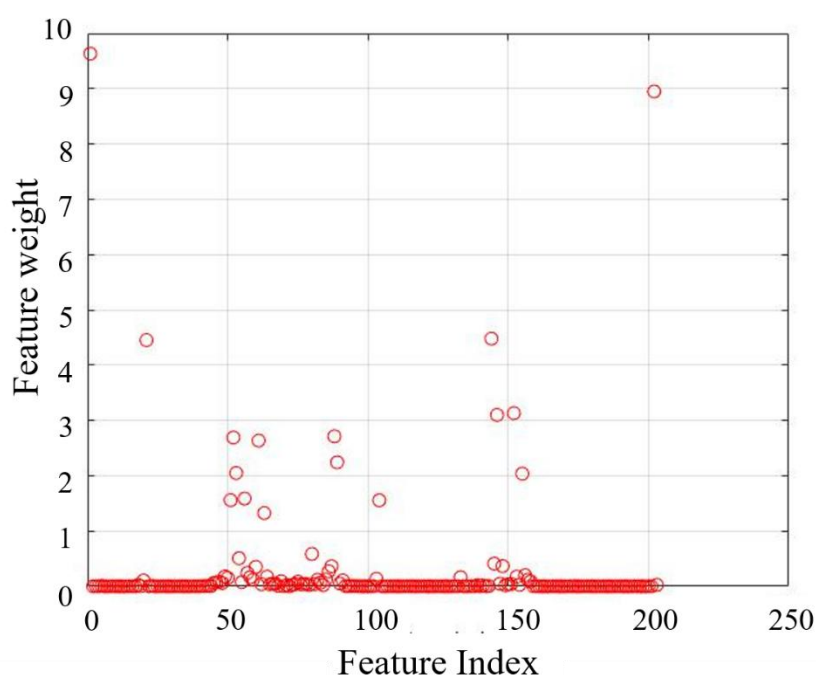


Figure 71 Weight analyzation by NCA.

5.6. 抽出された波長データを用いた機械学習結果

5.6.1. ハイパースペクトルデータに対する機械学習

抽出された波長データを用いて、機械学習を用いて鉱石粉体同定を実施した。本研究で用いたハイパースペクトルデータでは 204 の波長帯を学習させる必要があり、SBOS を実施する上で即応性の観点から問題があった。そこで、CNN と NCA を用いて鉱石粉体同定に重要な数波長帯のみを抽出し、それらの波長領域のみを学習に使用することで、計算資源を節約した。本研究では、学習モデルの性能比較を実施するために、派生型も含めた 19 種類の機械学習の手法を用いて、抽出済みのハイパースペクトルデータの同定を行った。使用したデータセットは、比較のために、1. NCA によって抽出された 5 波長帯のみをデータセットにしたもの、2. CNN によって抽出された 5 波長帯のみをデータセットとして使用したもの、そして、3. NCA の 5 波長帯に加え、CNN によって抽出された 1~5 波長帯を順々に加えたデータセットの全部で 7 種類のデータセットを用意した。

それら 7 つのデータセットについて、19 種類ある機械学習によって得られた解析結果を Table 16 に示す。QDA を用いた鉱石粉体同定の精度が最も高く、また、NCA によって抽出された 5 波長帯のみを用いるのではなくて、さらに CNN によって抽出された波長帯を加えていくにしたがって同定の精度が上昇していくことが示された。QDA 以外の一部の機械学習においては、入力するデータセット数の増加と精度との間に相関関係は見られず、抽出された特徴は全ての機械学習の同定にとって有益な情報であるとは限らないことが示された。QDA による機械学習結果から、204 全ての波長帯を用いた CNN による同定では 90.4%の精度であったが、NCA・CNN によって抽出された 10 波長帯のみで 87.2%の高精度で鉱石粉体同定を行えることを示した。すべての波長帯のデータを用いなくとも、少数の重要度が高いデータのみの解析を行うことで高い精度での同定が可能であることを示した。

Table 16 Machine learning results using extracted data.

	NCA (5 Wavelength Regions)	CNN (5WR s)	NCA (5WRs)+C NN (1WRs)	NCA (5WRs)+C NN (2WRs)	NCA (5WRs)+C NN (3WRs)	NCA (5WRs)+C NN (4WRs)	NCA (5WRs)+C NN (5WRs)
Method	Accuracy [%]						
Tree (Fine)	49.9	46	48.5	50.1	50	49.8	52.2
Tree (Med)	41.8	39.6	41	42.7	43.4	42.4	41.3
Tree (Coarse)	29.4	26.4	27.9	28.9	28.3	29.9	29.1
LDA	63.8	70.9	68.5	73.5	78.1	78.6	79.5
QDA	72.0	77.1	76.6	82.8	85.8	87.7	87.2
Naive bayes (Gaussian)	33	32.7	33.9	33	32.8	32.8	33.4
Naive bayes (kernel)	33.4	32.3	32.3	32.1	32.5	33	32.4
SVM (Linear)	64.7	66.1	67.2	71.4	73.7	74.7	73.8
SVM (Quadratic)	68.1	70	70.4	75.5	79.1	79.8	78.9
SVM (Gaussian)	59.8	58.1	63.3	62.9	64.5	64.9	63.4
SVM (Mid- Gaussian)	54.6	51.4	55	56.1	55.9	55.7	54.7
SVM (Coarse Gaussian)	39.9	38.3	41.6	41.2	41.6	40.5	38.8

)							
KNN (Fine)	54.6	52.9	55.4	59.1	60.8	61.1	60.4
KNN (Quadric)	56.8	53	58.1	58.3	57.3	59.2	56.8
KNN (Weight)	55.7	55.8	59.3	61	61.5	61.9	60.9
Ensembl e (Boost)	45.7	42.4	44.7	45.7	46.7	46.9	46.2
Ensembl e (Subspac e)	62.3	62.3	65.1	70.3	72	76.6	76.6
Ensembl e (KNN)	51.4	53.2	51.2	59.2	59.9	61.7	59.3
Ensembl e (KNN boost)	48.2	45.7	46.5	47.2	48.9	49.3	49.6

5.6.2. 機械学習手法の比較

CNN と NCA によって抽出された波長データについて、深層学習以外の 19 種類の機械学習手法を用いて解析を実施し、その同定精度について比較を行った。本研究で用いたハイパースペクトルデータには全てで 204 の波長帯が存在するが、それらの中でも特に鉱石粉体同定に重要な波長帯を CNN と NCA を用いて特定した。それら特定された少数の波長帯データのみを用いて、同定が可能かを実験した。実験結果から線形判別分析に分類される QDA が最も高性能な結果を示すことがわかった。また、学習させる波長帯数を増やしていくに従って精度が向上し、QDA においては、10 波長帯のみにおける学習で 87.2% の高精度で分類を行えることを示した。204 ある波長帯全てを用いた CNN の同定精度に匹敵するような高い精度を数波長帯のみの解析で示した。QDA について、学習データに対する混合行列を Figure 72 に示す。ここから、同じ含有量グループ内での同定ミスはあるものの、他の含有量グループにまたがった同定誤差が少ないことがわかる。

A1	96	2											1	
A2		99									1		1	
A3			100											
A4				42	1	7								
A5					82	5	13							
A6			1	9	1	67	22							
A7			1	4	5	35	54							
B1								96	4			1		
B2								4	92	6				
B3										104				
C1		1									92		6	1
C2												101		
C3											9		75	18
C4											1		23	79
	A1	A2	A3	A4	A5	A6	A7	B1	B2	B3	C1	C2	C3	C4

Figure 72 Confusion matrix of QDA result.

5.7. 考察

5.7.1. 深層学習による同定根拠の特定

ハイパースペクトルデータと深層学習を用いた鉱石粉体同定精度が 90%以上を示した。また、NCA と CNN を用いて少数の波長帯のみを抽出し、それらについて機械学習を実施したところ、87.2%という高精度で鉱石粉体同定を実施できた。しかし、それら機械学習によるヒ素含有量の同定が、果たしてヒ素の波長に基づいて行われているのかは未知である。そこで、ハイパースペクトルデータと深層学習による同定の根拠がヒ素由来であるかを調べるために、新たに試料を作成し、試験を実施した。学習データとして、石英に対して硫砒銅鉱を 4.32%含む長野県産硫砒銅鉱を混ぜ合わせた模擬試料を 4 種類作成した(粒径は 250 μm 以下に統一)。また、作成した模擬試料は、石英に対して長野県産硫砒銅鉱をそれぞれ重量比 0.5% (低濃度)、1.0% (中濃度)、1.5% (中高濃度)、2.0% (高濃度) 混ぜ合わせており、模擬試料の ICP 分析装置により解析した化学組成を Table 17 に示す。ヒ素、銅、鉄の組成について、それらは硫砒銅鉱の量と比例していることが示されている。模擬試料に含有される長野県産硫砒銅鉱については、同一試料由来のものを使用した。

Table 17 Chemical composition of test samples.

Samp.name	As [wt%]	Cu [wt%]	Fe [wt%]	En [%]
Low-conc. As	0.07	0.05	0.54	0.36

Mid-conc. As	0.10	0.17	1.33	0.55
Mid-high-conc. As	0.14	0.25	2.36	0.73
High-conc. As	0.17	0.33	3.32	0.87
Energite from Nagano	0.82	2.08	14.03	4.32

それら 4 つに試料に加え、Figure 73 の RGB 画像に示す石英による希釈を行わなかった長野県産硫砒銅鉱、石英のみの試料、合計 6 つの粉末状試料について Figure 74 に示すようにハイパースペクトルデータの取得と深層学習を行い、CNN による学習モデルを作成した。学習設定は、14 種類の試料の学習の際に用いたネットワークを使用した。また、学習データについても、全体データの 9 割を学習用に、残りの一割を学習に用いずにテストデータとして使用した。模擬試料のハイパースペクトルデータについて学習済みのモデルに前述の計 14 種類の試料 ABC を同定させたところ、Table 18 の混合行列に示すように、ヒ素濃含有量に基づいた同定を行うことができなかった。このことから、ヒ素を含有する鉱石粉体自体については高い精度での同定に成功したがハイパースペクトルデータを用いた深層学習において、機械の判断根拠がヒ素含有量に依らず、様々な元素・鉱物の影響を受けた上で複合的に判別していることが考えられる。石英や他の脈石成分などの鉱石中の優勢な鉱物のスペクトルの影響を包括的に受けたうえで同定が行われる。それらについては、学習データのヒ素含有量を高めることには限界があり質の良いデータセットを用意できなかったこともその一因と考えられる。また、ハイパースペクトルデータは、撮影対象の反射強度の取得を行うが、ヒ素を含有している硫砒銅鉱そのものの反射強度が成分の大半を占める石英と比べ著しく低く、本研究で用いたハイパースペクトルカメラの性能ではその微細な波長帯ごとの差異を捉えきれなかった可能性が考えられる。今後質の良いデータセットを用いた検証が今後の課題である。

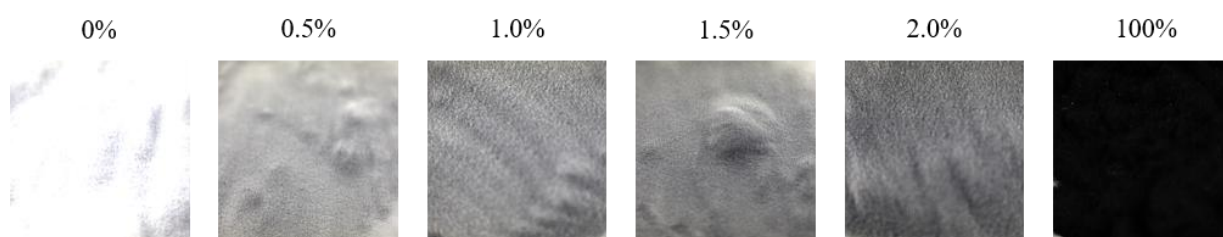


Figure 73 RGB images of test samples.

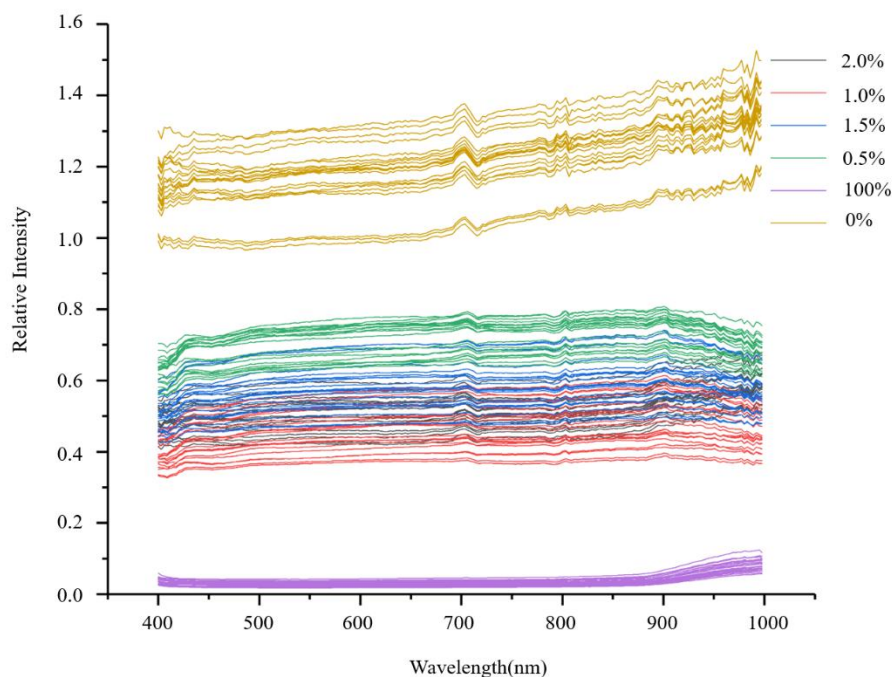


Figure 74 Spectrum data of test samples.

Table 18 Deep Learning results of test samples.

	A1	A2	A3	A4	A5	A6	A7	B1	B2	B3	C1	C2	C3	C4
Very High	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
High	655	577	149	359	448	570	565	0	0	1	144	174	16	116
Medium	113	191	214	182	99	116	121	332	563	317	601	591	745	652
Low	0	0	402	208	218	82	73	214	132	158	23	3	7	0
Very Low	0	0	3	14	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Quartz	0	0	0	5	0	0	9	222	73	92	0	0	0	0

5.7.2. CNN の重み解析

新たに作成した試料を用い深層学習における同定の根拠を探った実験から、ハイパースペクトルデータと深層学習を用いた鉱石粉体同定ではヒ素による同定を行っていないことが判明した。そこで、今度はCNNの重み解析を行うことで、ヒ素含有量の同定根拠ではなく、本研究で用いたデータセットに対する同定根拠となる波長帯を特定した。CNNは、画像の局所的な特徴抽出を担う畳み込み層と、局所ごとに特徴をまとめあげるプーリング層を繰り返した構造となっており、特徴抽出を行うことができる。本研究では、CNNを特徴抽出器として用いることで、各波長帯が同定に及ぼす重みを算出し、同定に重要

な影響を与えた波長帯を特定した。各 A1~C4 までのハイパースペクトルデータを ABC の 3 つに平均化しグループ分けした波長データと、CNN からの解析結果から判明した各波長帯における重みを同一グラフ上に重畳したものを Figure 75 に示した。青線部分が重みを示しており、430 nm・700 nm・900 nm 付近で重みのピークを示している。それらピークは試料 ABC の反射強度のピークと対応している部分もあり、反射強度の強弱が CNN による鉱石粉体同定に与えた影響が大きいことが示されている。試料そのものが硫砒銅鉱含有鉱石を石英で徐々に希釈したものであることから、スペクトル形状の大きな差は見受けられずに反射強度の差によって同定を行っていたことが考えられる。しかしながら、ある一部の波長帯のみの重みが突出して高いことから、反射強度以外の要因によって区別がなされていたと考えられ、今後の検討課題である。本研究では、これらの波長帯を抽出することで、より効率性の高い機械学習による鉱石粉体同定を実施したが、それらの同定根拠については、ヒ素含有量に由来するというよりもむしろ、データセット内における反射強度の差が大きな影響を与えていることを示唆している。よりロバスト性の高い SBOS 構築のためには、データセットの多様性や質・量を充実させる必要があると考えられる。

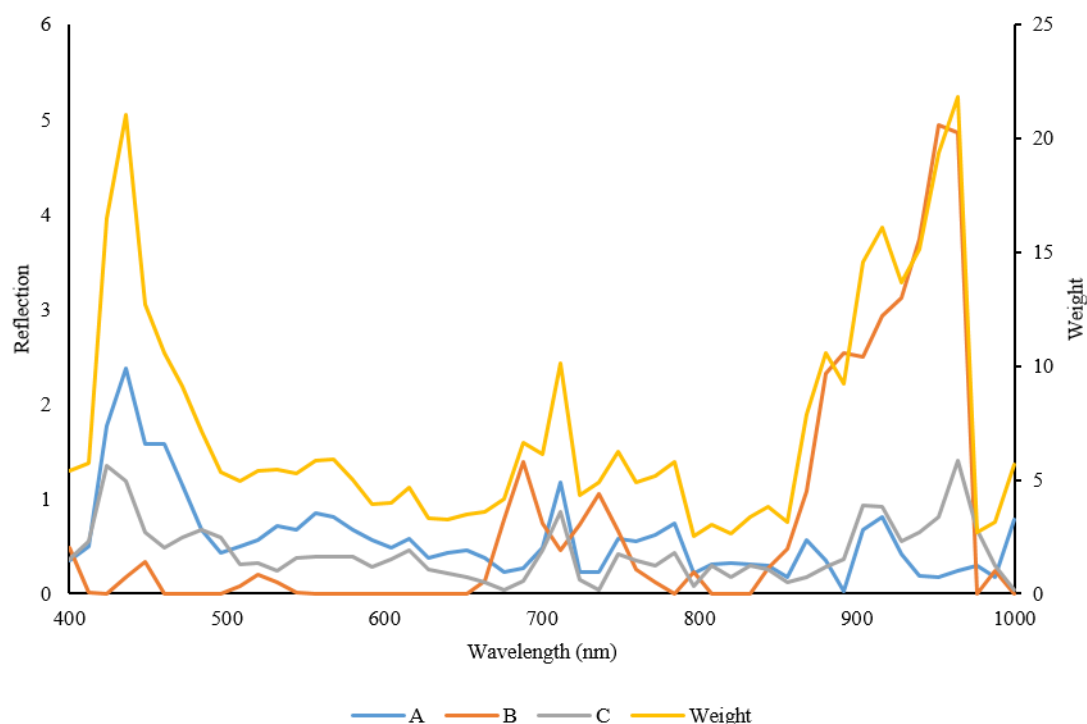


Figure 75 Hyperspectral data of ABC and Weight.

5.8. ヒ素同定のための深層学習アルゴリズムに関する結論

本研究では、ハイパースペクトルデータと、深層学習・その他の機械学習を用いて行った、SBOS に向けたヒ素を含有する鉱石粉体試料の同定解析試験について述べた。ハイパースペクトルデータと深層学習を組み合わせた鉱石粉体同定は 90%以上の高精度で実施できる一方で、計算処理負荷の高さや、またカメラ自体が高価であることから実操業導入への障壁となっていた。そこで、機械学習手法である NCA と CNN を用いてハイパースペクトルデータの中でも特に同定に重要な 10 波長帯を特定した。その後、

それら少数の波長帯のみを含有する波長データについて、機械学習を実施し鉱石粉体同定を実施した。その際、機械学習手法の性能評価のために、全部で 19 種類の機械学習を実施した。結果として、線形判別分析手法に区分される QDA を用いることで、87.2%の高精度で判別が実施されることがわかった。10 波長帯のみの解析で同定を実施できることから、より高速にデータの取得・解析・同定を行えるほか、より安価なマルチスペクトルカメラの導入の可能性を示した。

さらに、深層学習の判断根拠を同定するために、ヒ素含有量を人工的に調整した試料を作製し、深層学習を用いて学習モデルを作成した。作成したモデルに、ヒ素含有量既知のテスト試料 ABC を同定させたところ、ヒ素含有量による正確な同定ができなかった。このことから、深層学習によって、ヒ素を含有する鉱石粉体の同定はできるが、その判断根拠はヒ素含有量に依らないことが判明した。そこで、学習済みの CNN について出力に影響を及ぼした重みを算出することで、同定根拠となった波長帯を特定した。作成した試料が硫砒銅鉱を石英で徐々に希釈したものであることから、同定基準が反射強度の線形性に起因するものであると考えられるが、ある特定波長帯において大きな重みを示していることから反射強度以外のスペクトル形状に何らかの変化が生じていることが考えられ、今後検討が求められる。

6. 異高度スペクトル画像レジストレーションプロトコルの開発

6.1. 本章の背景

鉱山開発は、周囲の生態系を大幅に改変するため、多くの環境問題を誘発する傾向があることが広く認識されている[133], [134], [135]。具体的には、採掘活動によって未利用のまま地表に露出した重金属鉱物は、空気に触れると酸化を受ける。この過程で重金属が雨水や地下水に溶け出し、土壤汚染につながる[136]。検出を目的としたリモートセンシング技術の活用は、広大な土壤汚染箇所をカバーできることから、大きな可能性を秘めている。汚染が重金属汚染であることを考えると、資源開発の分野で一般的に利用されているアプローチを採用することが適しているかもしれない[137]。各鉱物が固有のスペクトル帯を持つことは広く認識されており、分光法は、スペクトルデータを分析することによって、複数の鉱物種を区別するために採用することができる[138], [139], [140], [141]。

衛星に搭載された分光カメラから得られたデータの解析は、リモートセンシングによる資源開発において鉱物の空間分布を評価するために使用される。近年、深層学習を用いた鉱物同定手法の導入など解析技術の著しい進歩や、衛星打ち上げコストの低下によりデータ収集が身近になったことで、衛星分光データの活用が進んでいる。データ処理やデータへのアクセスは進歩しているものの、ハードウェアの制約からスペクトルの幅広いデータを調べることはできず、データの質の向上が求められている。スペクトルデータの主な特徴は、空間分解能とスペクトル分解能である。しかし、ほとんどの分光カメラの場合、両者の値には相関関係があり、一方のパラメータを上げると必ずもう一方のパラメータの値が下がる。その結果、大幅な改善が達成される可能性は低い[142]。したがって、衛星のスペクトル画像は、空間分解能を向上させる必要がある。

近年、世界的に航空スペクトルデータの取得が大幅に増加している。この背景には、ドローン、航空機、衛星技術の進歩と、コストの低下がある。それにもかかわらず、これらのデータ間の関連性を確立することに成功していないのは、高度のばらつきと、データが収集された場所の多様性に起因している。本研究では、人工的なデータを導入することなく、人工衛星、航空機、ドローンなど異なる高度から収集されたスペクトルデータ群を重ね合わせることで、高解像度のスペクトルデータを生成することを目的とした。この研究のユニークな点は、スペクトルを作成しないため、ユーザが未処理のデータに直接アクセスできることである。スペクトルデータの空間分解能を向上させるために、これまで様々な手法が提案されてきた。我々の目的は、人工的に作成したデータを使用することなく、詳細度の高いスペクトルデータを作成することである。さらに、散発的に収集されるスペクトルデータをデジタルツインプラットフォーム上で解析することも目的とした。

衛星データとドローンデータの間には、その空間的なカバー範囲という点で格差がある。そのため、我々の手法では、衛星データを活用し、広い地域を初めて広範囲に調査する。この調査は包括的なものではなく、汚染地域を正確に特定するためのものである。最初のドローン調査の後、汚染されたと推定される地域でその後の空中検査を実施し、より包括的な調査を行う。今後の目標は、データ量の増加に対応できるデータツインプラットフォームを構築することである。デジタルツイン技術の活用は、データの統合と分析の基本的な基盤として、我々のアプローチには不可欠である[143]。

デジタルツインは、実際の環境やプロセスの仮想レプリカを生成することを可能にし、リアルタイムの予測、最適化、監視、管理を可能にする。鉱業や環境モニタリングの文脈では、デジタルツインは、複数のソースからのスペクトルデータを統合し、様々なセクションにわたる完全な分析を容易にするための

強力なフレームワークを提供する。我々の研究は、洗練された画像登録アルゴリズムを採用し、スペクトル画像の空間解像度を向上させ、デジタルツイン技術を活用することで、採鉱や環境管理においてより多くの情報に基づいた意思決定を行う。本研究では、プラットフォーム上の空間解像度を向上させるための新しいスペクトル画像登録技術を提示する。さらに、処理頻度の低い巨大データセットを統合するためのデジタルプラットフォームプロトコルを提案する。

6.1.1. 既往研究

人工衛星から得られる画像データ、特にハイパースペクトルデータの解像度が低いことから、この解像度を向上させる方法について多くの研究が行われている。横谷氏によると、ハイパースペクトル画像の解像度を向上させる技術は、ハイパースペクトル超解像（複数画像、単一画像）、サブピクセルマッピング（または超解像マッピング）、ハイパースペクトルシャープニング、ハイパースペクトルおよびマルチスペクトルデータ融合の4つのカテゴリに分類することができる[144]。これらの用語の定義は完全には明確ではないことに注意することが重要である。例えば、超解像やパンシャープニングをデータ・フュージョンの異なる形態と分類する著者もいれば、高解像度のハイパースペクトルデータを「超解像」の一例と見なす著者もいる。超解像はデータ・フュージョンの特定の形態を構成する。

6.1.1.1. 超解像

Yokoya (2018) によると、超解像には2つの異なる形態がある：1. 複数の低解像度画像から高解像度画像を再構成する複数フレーム超解像と、2. 学習ベースの超解像である[144]。線形決定論的モデル[145]や深層学習に基づく手法[146], [147], [148], [149]などの超解像手法が提案されている。

6.1.1.2. サブピクセルマッピング

サブピクセルマッピングは、フラクショナル画像をより高解像度の分類マップに変換する技法であり、これによりサブピクセルスケールで様々なクラスの空間分布を取得することができる[150]。代表的なアルゴリズムとして、Attraction Model、Pixel Swapping Algorithms、Genetic Algorithms、Hopfield Neural Networkなどが知られている[150]。最近では、CNNモデルを用いた手法も提案されている[151]。

6.1.1.3. パンシャープニング

パンシャープニングは、低解像度のスペクトル画像と高解像度のパンクロマチック（PAN）画像を組み合わせ、高解像度のスペクトル画像を作成するプロセスである[152]。パンシャープニングのアルゴリズムは大きく3つのカテゴリに分類できる（Component Substitution: CS、Multiresolution Analysis: MRA、Sparse representation）[153], [154]。CS（または射影置換）には、IHA、PCA、GSなど多くの派生形がある。従来、CSは主にマルチスペクトルデータに対して研究されてきたが、ハイパースペクトルデータの台頭により、これらのデータに対するパンシャープニングの研究が行われている[155]。2つ目の手法であるMRAには、HPF、HPM、Indusion、MTF-GLP-CBD、ATWTなど、いくつかの手法が提案されている。

6.1.1.4. ハイパー・マルチスペクトルデータ融合

パンシャープニングのプロセスとは対照的に、高解像度画像にはスペクトル情報が組み込まれており、それによってスペクトル信号のより正確な再構成が容易になり、パンシャープニングの拡張と部分空間法に基づくアプローチの2つのカテゴリに分類することができる[144]。このデータ融合の問題に対処するために、さまざまな理論的枠組みを利用した多くの手法が提唱されてきた。これにはCS、MRA、スペクトル混合除去、ベイズ確率などが含まれる[153]。これに比べ、ハイパースペクトルの解像度を向上さ

せる取り組みは、上記で説明したように、元のデータから擬似スペクトルを生成することになる。多くの方法論が提案されているが、生データを修正しない画像レジストレーションの統合的アプローチはまだ研究されていない。

6.2. 方法・材料

6.2.1. 異高度スペクトル画像レジストレーションプロトコル。

6.2.1.1. スペクトル画像レジストレーションの手順

提案するプロセスは、その場ハイパースペクトル画像、ドローンマルチスペクトル画像、衛星マルチスペクトル画像など、複数のソースからスペクトルデータを取得することから始まる。これらのソースから取得されたスペクトル画像は、高度や撮像条件の不一致の結果として、空間分解能と遠近感の不一致を示す。この困難に対処するため、Figure 76 に示すような多段階の画像登録手順を利用する。この手順では、スペクトルデータの射影歪みを補正し、トップダウン透視変換を生成し、特徴点の抽出と選択によってスペクトル画像の位置合わせを行う。我々の技術は、様々な標高から取得されたスペクトルデータを体系的な方法でマッチングさせることにより、空間分解能を向上させ、鉱業および環境データの正確な分析を促進することを目指している。

異なる高度や異なる航空測量手法から得られたデータを統合することで、次のような利点が得られる。第一に、人工衛星から得られるデータは、カメラから撮影対象までの距離が数百キロメートルであり、地表の解像度は数十メートルに限られる。そのため、地表を網羅的に調べることはできないが、広い範囲を予備的に調査することは可能である。ドローンなど上空数十メートルから取得したスペクトルデータの地上分解能は数センチで、衛星データよりかなり高い。広域の調査には向かないが、特定の地域を高精度で調査するのに活用できる。ドローンと衛星の中間の高度にある航空機から得られるデータは、画像登録において極めて重要な役割を果たす。衛星データの解像度はドローンデータと大きく異なるため、特徴点の自動抽出は現実的ではない。しかし、中間の高度から得られる中間の解像度のデータを画像登録プロセスに組み込むことで、衛星データとドローンデータの相互登録が可能になる。

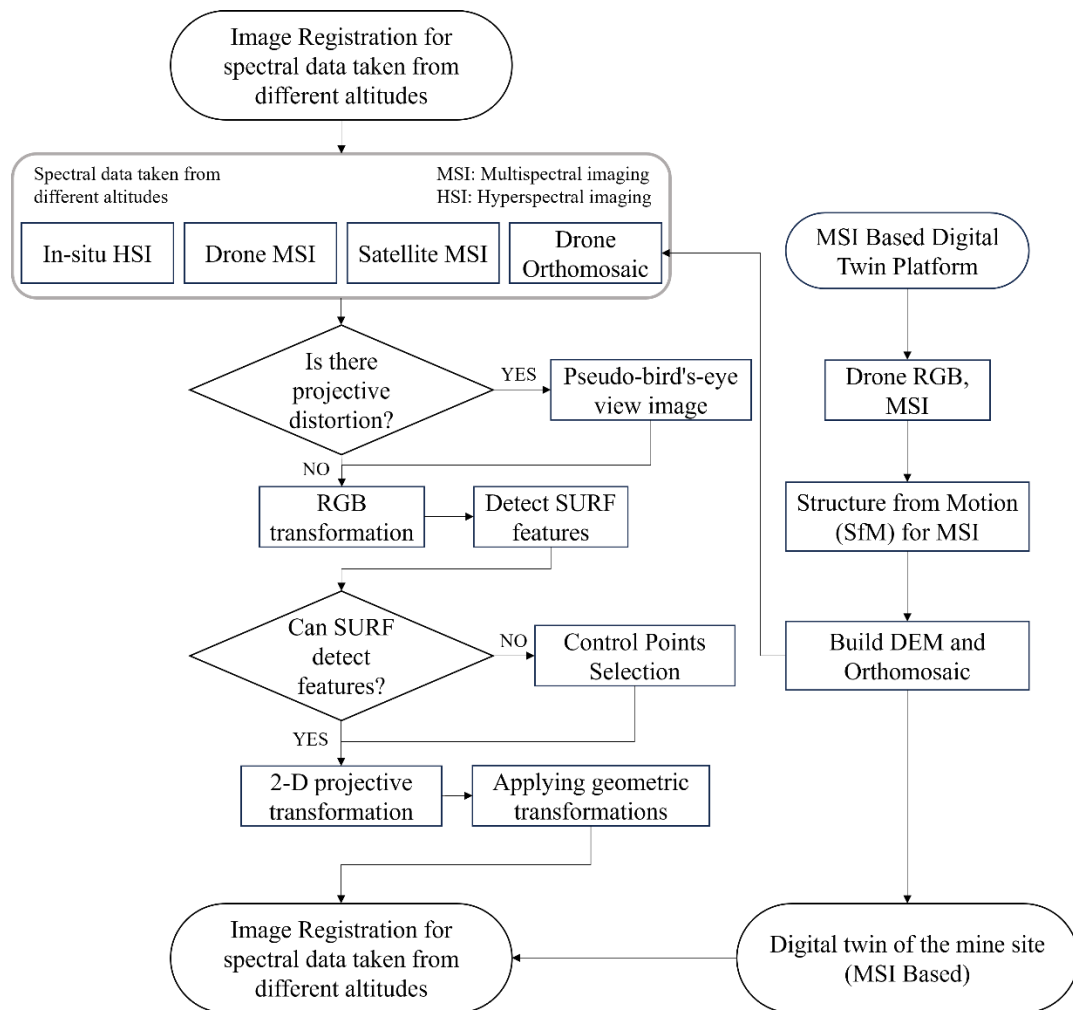


Figure 76 Flowchart of the proposing protocol.

様々な高度で得られたスペクトルデータの画像レジストレーションの手順をフローチャートに示す。フローチャートの初期スペクトルデータソースは、「In-situ HSI」、「Drone MSI」、「Satellite MSI」、「Drone Orthomosaic」である。その後、投影歪みがあるかどうかの判断手順に移る。歪みがある場合は「擬似鳥瞰画像」へ、歪みがない場合は「RGB変換」と「SURF特徴の検出」へと進む。2つ目の判定ポイントでは、特徴点抽出技術であるSURF（Speeded Up Robust Features）が特徴点を検出できるかどうかを確認し、検出できる場合は「コントロールポイントの選択」に進み、検出できない場合は「2次元射影変換」を行う。また、スペクトルデータ源から取得されたドローン画像を使用して、デジタルツインモデルが作成される。最後に、得られたデジタルツインは、高度変動スペクトル画像のレジストレーションに使用される。Table 19に、位置合わせが必要なスペクトルデータを示す。オルソモザイクデータは、ドローン画像からデジタルツインを構築する際に生成される。

Table 19 Spectral dataset.

Name	Type of spectral	Camera	Altitudes	Bands Number	Wavelength (nm)
In-situ	HSI	Specim IQ	1 m	204	400 ~ 1000
Drone	MSI	P4 Multispectral	50 m	5 (Blue, Green, Red, RE and NIR)	450 ~ 840
Orthomosaic	MSI	P4 Multispectral	50+ m	5 (Blue, Green, Red, RE and NIR)	450 ~ 840
Satellite	MSI	AVNIR-2_1B1	690 km	4 (Blue, Green, Red and NIR)	420 ~ 890

6.2.2. デジタルツインプラットフォーム

物理的なモノやプロセスを仮想化したデジタルツイン技術の応用は、スマートシティ、自動車、産業、医療など、多くの産業で拡大している[156]。デジタルツインは、サイバーフィジカルインテリジェントシステムの設計と運用を変革するツールであり、リアルタイムの予測、最適化、監視、制御を可能にする[157]。システムまたはアイテムのライフサイクル全体を通じて関係者を支援するモデリングとシミュレーションは、この技術の基本的な構成要素である[158]。概念図を Figure 77 に示す。スペクトルデータの収集が世界的に加速しているにもかかわらず、データ間の連携がまだ不十分で、データ処理が不規則になっている。そこで、現地調査や室内実験で得られたスペクトルデータを簡単に収集・解析できる 3D プラットフォームを構築した。UAV で収集した地雷の RGB 写真を Structure from Motion で解析し、デジタルツインの基礎モデルとなる 3D データを作成する。

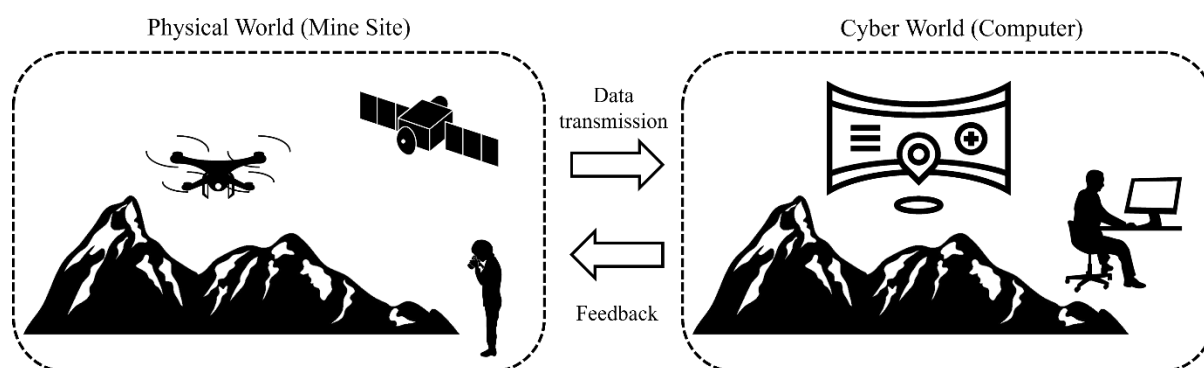


Figure 77 Digital Twin for mining.

6.2.3. スペクトルデータの射影歪み

低高度のスペクトルデータとして、三脚に取り付けたハイパースペクトルカメラ (Specim IQ) を用いて、鉾山表面の俯瞰画像を撮影した。Figure 78 に示すように、三脚から撮影した画像は斜め方向に投影歪みが生じるため、画像の解像度が前方から後方に向かって低下する。鉛直方向から撮影した高度が異なる分光画像 (Virtual Top View) と正しく画像位置合わせするためには、鉛直方向から撮影したかのような射影変換 (鳥瞰画像変換) を行う必要がある。本研究では、全バンド画像に対して鳥瞰変換を行い、カメラの撮影角度に基づいて変換行列を近似した。カメラの内部パラメータ行列 K 、対応する回転行列 R と R' 、および 3 次元位置 c と c' をそれぞれ用いて、撮影カメラの透視投影行列 P と、平行移動および回転された鳥瞰カメラの透視投影行列 P' を生成する。

$$P = K[R| - Rc]$$

$$P' = K[R'| - R'c']$$

ここで、撮影に使用する携帯端末に搭載された加速度センサの値から回転行列 R 、 R' を算出することで表すことができる。 R から R' への回転による座標変換行列 (回転行列) を ΔR とすると、撮影画像中の任意の点を回転変換 ΔR により投影する 2 次元投影変換行列 $H\Delta R$ は、上式から以下のように表すことができる、

$$H_{\Delta R} = K(\Delta R)K^{-1}$$

となり、加速度センサの重力情報から求めることができる。一方、 c から c' センサ行移動ベクトル Δc は次のようになる、

$$\Delta c = c' - c$$

Δc は、生成される擬似俯瞰画像の空間分解能に依存する。通常、 Δc は、対応点探索処理の効率を向上させるために、低高度画像の空間解像度と擬似俯瞰画像の画像解像度が等価になるように設定される。画像中の任意の点を平行移動量 Δc に応じて射影する 2 次元射影変換行列を $H\Delta c$ とすると、ユーザ視点カメラで撮影した画像を鳥瞰カメラから擬似鳥瞰画像に射影する 2 次元射影変換行列 H_I は、以下のようになる。

$$H_I = H_{\Delta c}H_{\Delta R}$$

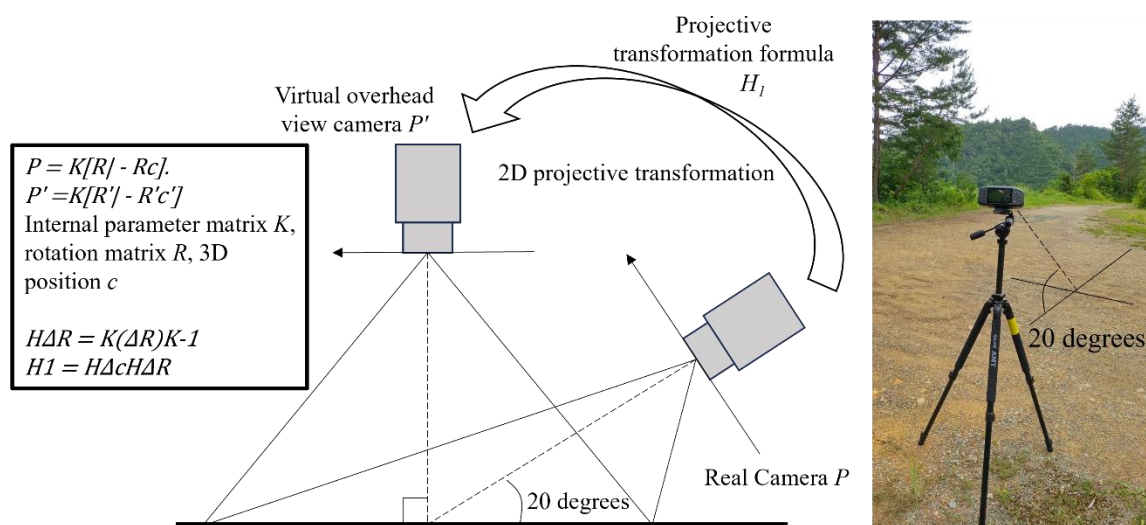


Figure 78 Bird's eye transformation.

6.2.4. スペクトル画像レジストレーション

本研究では、低空間分解能のスペクトル画像の局所的な空間分解能を向上させるために、異なる高度から取得された空間分解能の異なるスペクトル画像を重畳する。Figure 79 は位置合わせの手順を示している。限定された領域で取得された高空間分解能分光画像（調査地点の固定画像よりも低い高度から取得された分光画像）を移動画像とし、広大な領域で取得された低空間分解能分光画像を固定画像とした。これらの画像から、データキューブから RGB 画像を作成し、マッチングされた画像間で、制御点の選択による特徴点の抽出を行った。その後、以下の手順で画像レジストレーションが行われた：1. 姿勢推定、2. 変換モデルの推定、3. リサンプリングと変換。低高度から撮影された画像の空間分解能を維持するため、高高度から撮影されたスペクトル画像と一致するように画像レジストレーションが行われた。高度の違いによってデータの解像度がかなり異なるため、特徴点を自動的に抽出するのは難しいが、コントロールポイントを設定することによって手動で位置合わせを行うことができる。今回の調査で使用したスペクトル画像は高度に大きなばらつきがあったため、特徴点を手動で選択し、位置合わせを行った。

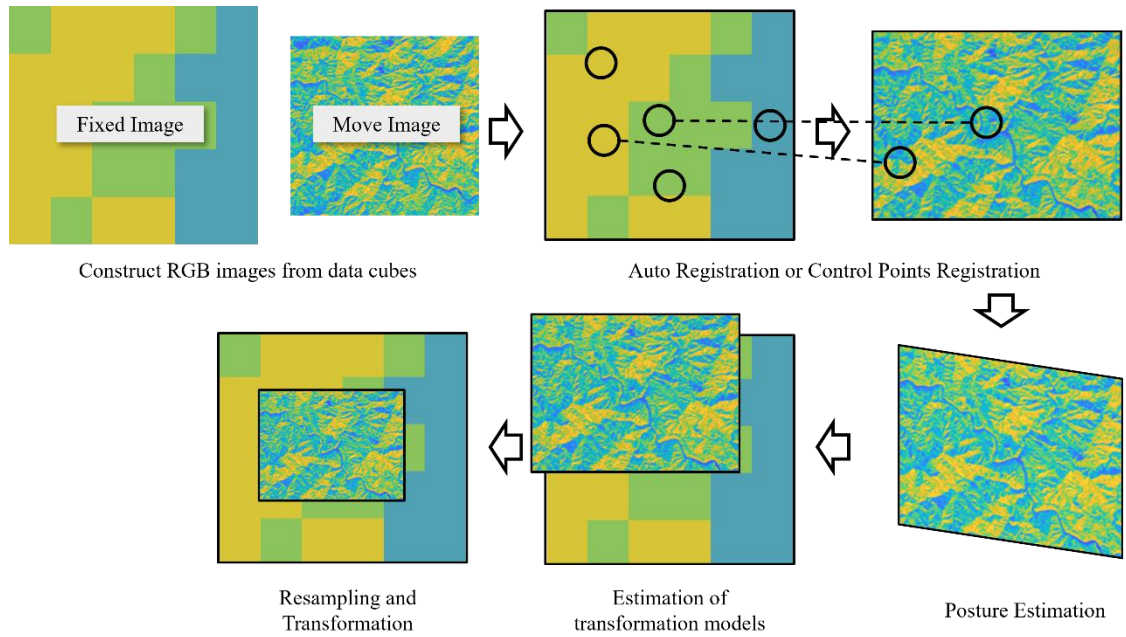


Figure 79 Schematic diagram of image registration.

6.2.5. 鳥瞰画像変換プロセス

本章では、表面解像度や高度に大きなばらつきがあるデータを扱う場合、SURFのような従来の特徴点抽出アルゴリズムの欠点について議論する。この問題を解決するために、コントロールポイントを手作業で選択する対話的な特徴点抽出法を示す。指定された制御点を基点として、我々は類似性変換モデルを推定した。計算された幾何変換を用いて、出力画像の位置を入力画像の対応する位置に対応付けることで、画像登録が達成される。ピクセルの中心が揃っていない場合は、補間を利用する。最後に、すべてのバンド写真にわたって位置合わせを確実にするために、同じ幾何変換が他のスペクトルバンドの画像を登録するために行われる。プロセスを Figure 80 に示す。

a) 特徴点探索

画像処理やコンピュータビジョンの仕事では、SURF (Speeded-Up Robust Features) のような特徴点抽出アルゴリズムが一般的に有用である。しかし、この作業で扱ったように、高度が大きく変化したり、表面の解像度が大きく違ったりするデータには適応できなかった。そこで、制御点として機能する特徴点を対話的に抽出することで、代替できるようにした。固定画像と移動画像の間で対応する点は、対話型選択ツールを開いて選択した。少なくとも 4 組のコントロールポイントを選び、有効な移動制御点と固定制御点の組の座標を決定し、制御点への射影変換を近似した。

b) 変換モデル

特徴点を探した後、幾何変換を推定した。この例では、平行移動、回転、等方拡大縮小の複合効果により、動画画像の形状は変化しないため、変換モデルとして相似変換を利用した。回転後の行列 X と Y は、幾何変換に従い、回転を θ とすると、次式で与えられる。

$$\begin{pmatrix} X \\ Y \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta & 0 \\ \sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ 1 \end{pmatrix}$$

また、等方的なスケーリングの場合、 X 方向に S_x 倍、 Y 方向に S_y 倍でスケーリングすると、スケーリング後の行列 X と Y は以下ようになる。

$$\begin{pmatrix} X \\ Y \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_x & 0 & 0 \\ 0 & S_y & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ 1 \end{pmatrix}$$

c) 画像レジストレーション

画像の計算された幾何学変換を適用することで、画像の位置合わせが可能になった。出力画像の位置を入力画像の対応する位置にマッピングすることで、出力画像のピクセルの値が得られた。出力画像のピクセルの中心が入力画像のピクセルの中心と一致しない場合、入力画像内の補間を用いて出力ピクセルの値を決定した。

d) 他のスペクトルバンドへの画像登録

すべてのバンドの画像を同じ座標上に重ね合わせるために、画像の幾何変換を残りのスペクトルバンドに適用した。

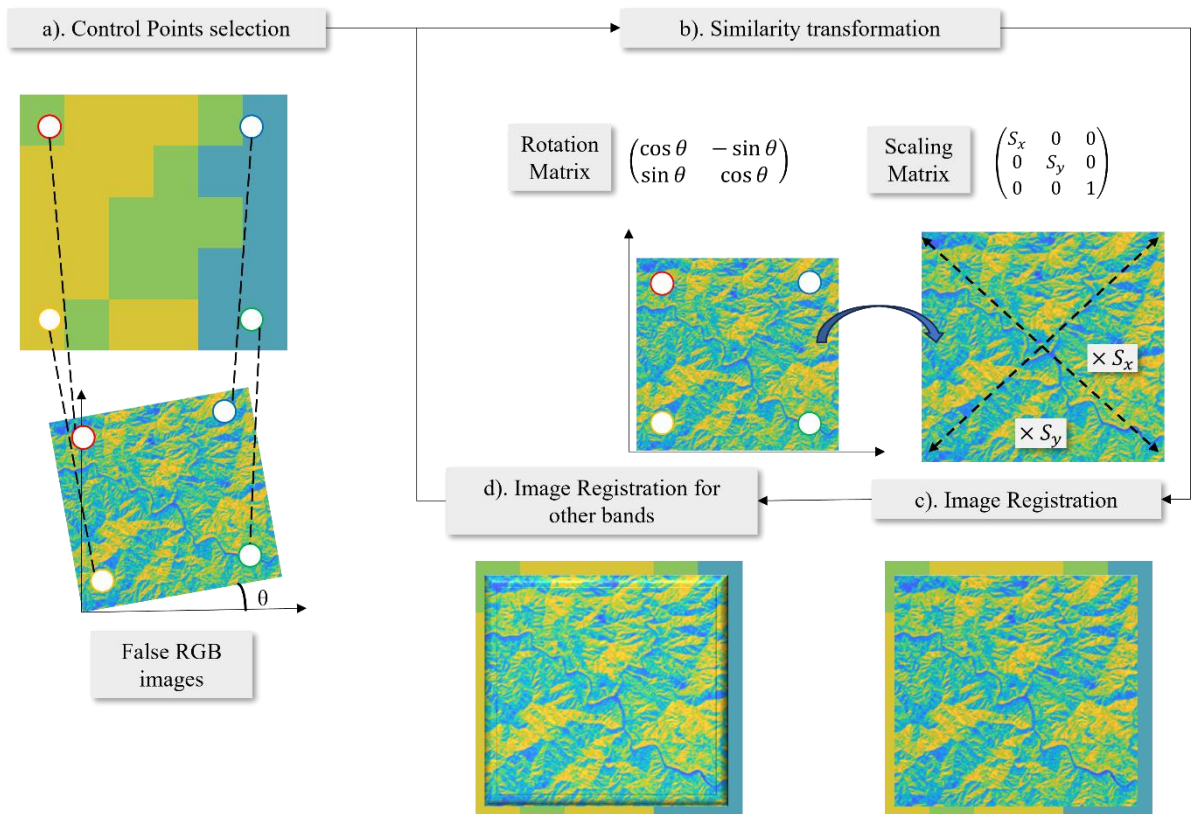


Figure 80 A schematic diagram of control points selection and image registration.

6.2.6. 全体プロセス

Figure 81 は、ドローンと衛星ソースから収集されたスペクトル情報を使用することにより、低空間分解能を解決するためのプロセスを示している。まず、異なる高度で得られた様々なスペクトル画像が表示される。これは、現場 (Specim IQ) HSI、ドローン (DJI P4)、衛星 (AVNIR-2) MSI からなる。衛星からのスペクトル画像は空間分解能が限られているため、より低い高度からのスペクトル画像を利用することで状況を改善することができる。空間データの表示を改善するために、収集されたデータの画像レジストレーションがデジタルツインプラットフォーム上で行われ、実世界のデータとバーチャル技術が融合される。特徴点の抽出と選択は、画像レジストレーションに関わる手順のひとつである。これらの方法を実践することで、地図を拡大しても高解像度のスペクトル画像を見ることができるよう、空間データの視覚化が改善される。

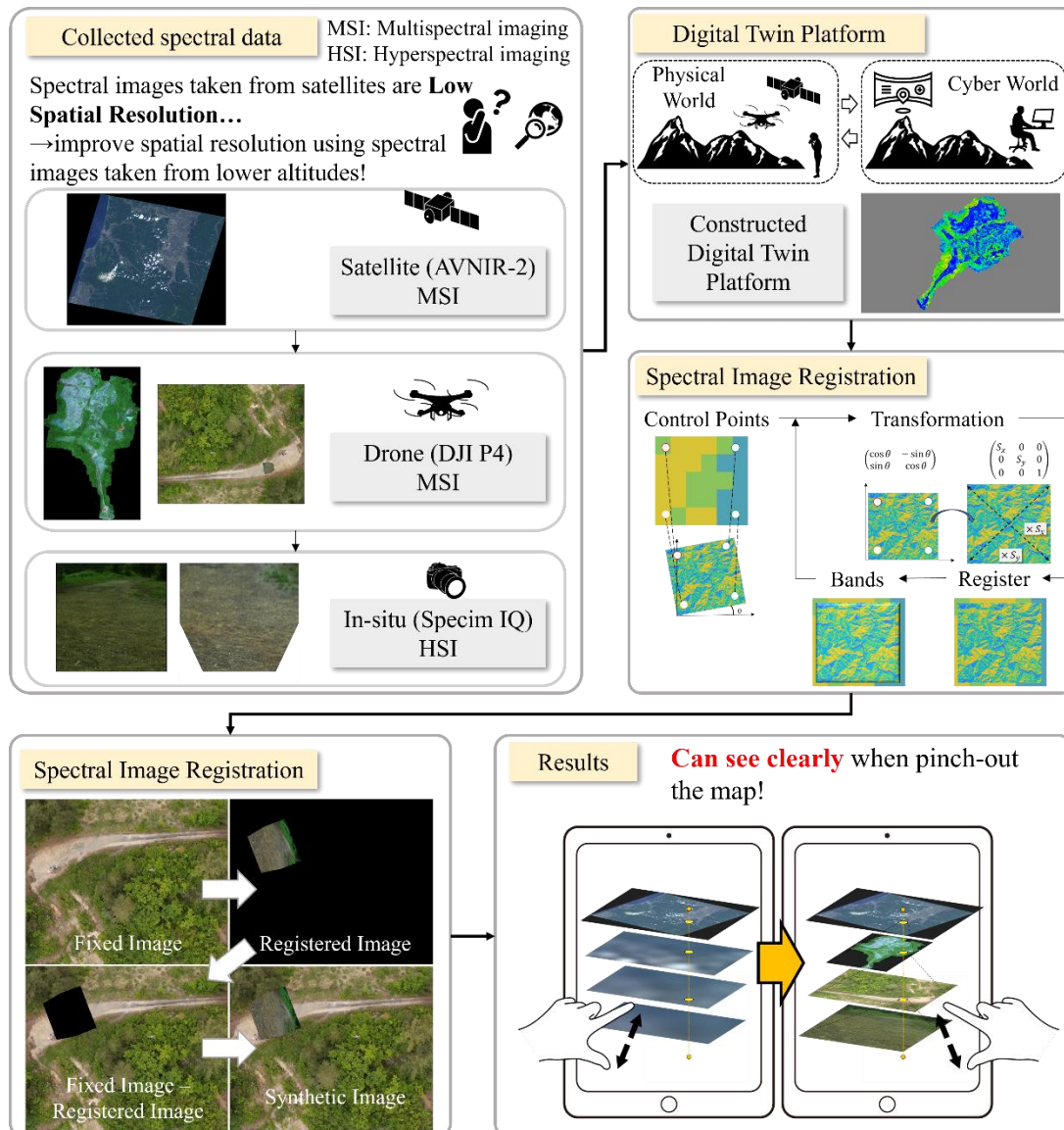


Figure 81 How the proposed system works.

6.3. 提案するシステムの構成例

提案システムの実際の採掘現場への応用について説明する。提案システムは本章の主題である。本節では、提案システムを実際に行った実験を紹介する。実験は秋田県のフィールドで行われた。このフィールドには休廃止鉱山があり、酸性鉱山廃水の排出が続いていることから、日本の政府機関は鉱山廃水の中和処理プログラムを開始した。このため、土壌汚染の可能性が懸念され、この技術の実施可能性を調査することが検討されている。この研究フィールドは広範囲に及ぶため、従来の土壌サンプリングは困難である。この課題に対処するため、広域探査を容易にする衛星データと高解像度ドローンデータを統合することにより、包括的かつ詳細な土壌分析を実施することを目指した。これまでの研究で、重金属鉱物の同定におけるハイパースペクトル画像の可能性が実証されており、この技術を応用することで効率的な調査が可能になると期待されている[89]。

6.3.1.1. 3D モデリング

Figure 82 に示すように、UAV で取得した画像から Structure from Motion を用いて地雷の 3 次元モデルを生成した。その結果、デジタルツインプラットフォームが確立され、データ収集と分析の基盤となった。図には、地理的マッピングと分析に関連するさまざまなデータの可視化が描かれている。画像には 4 つの部分があり、それぞれ異なる種類のデータ可視化が表示されている。左上には、ある地域の 4,000 枚のスペクトル写真がある。右上には、同じ地域の高さレベルの鮮やかな 3D 表現が見られる。青から赤への色のグラデーションは、標高の低いところから高いところまでを示している。画像の左下には、地形と植物をリアルに表現したものがあり、RGB の自然な色合いで詳細な 3D モデルを表示している。右下のセクションには、NDVI を偽色で表現した別の 3D モデルが示されている。この NDVI 3D モデルは、植生の密度と健全性を調べるのに役立つ。このプラットフォームでは、次のセクションで説明するさまざまな高度な画像レジストレーション技術の開発により、取得したスペクトルデータの解析と表示が可能になった。これにより、スペクトルデータの横断的な処理が可能になり、鉱物資源探査にも役立つ。

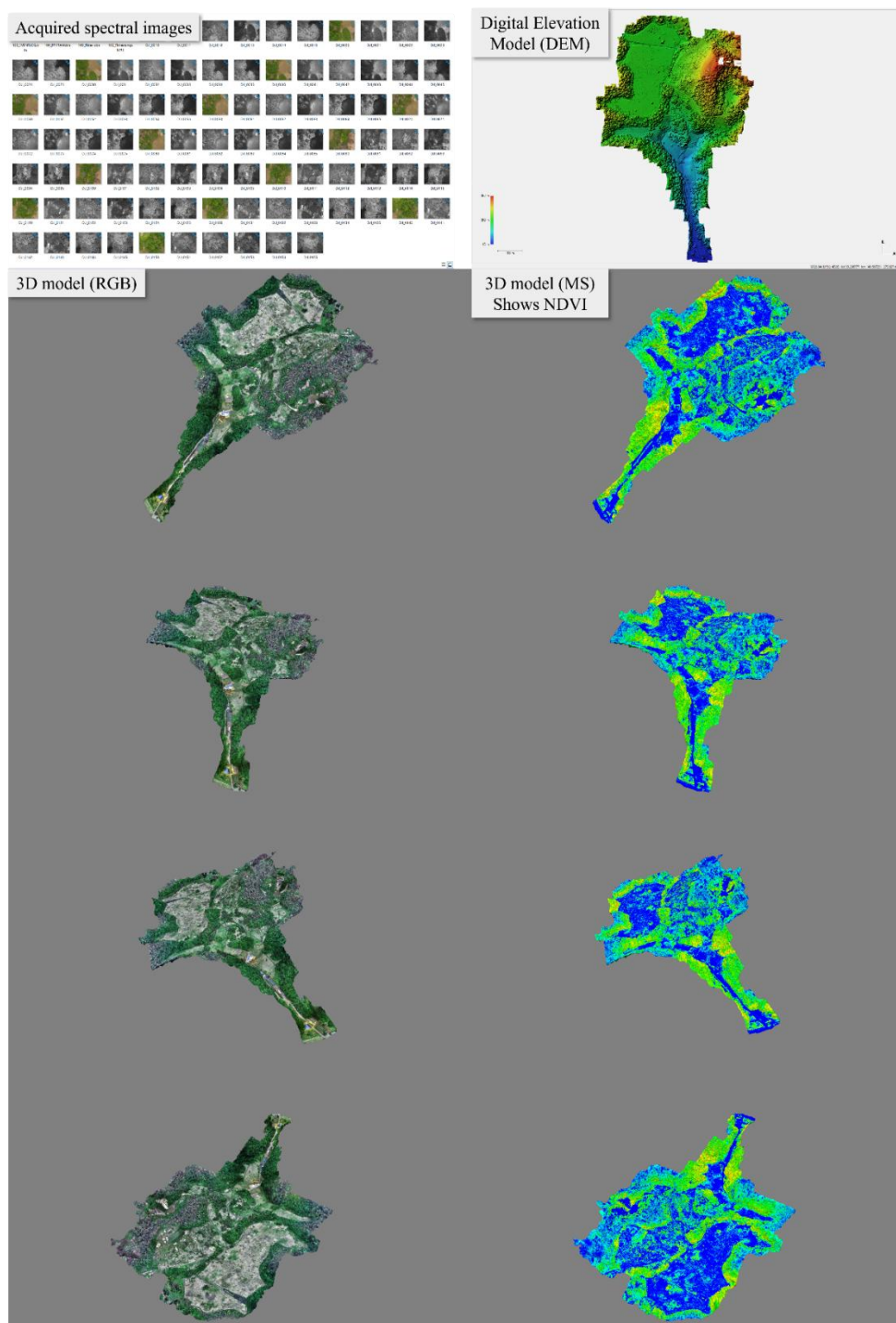


Figure 82 A constructed 3D model.

6.3.2. 鳥瞰画像変換

カメラは地表面に対して 20 度の角度をつけて、鳥瞰画像の修正を実現した。ハイパースペクトル画像の他のバンド画像は、RGB 画像の鳥瞰変換と同じ変換行列を使用して変換されている。手順は Figure 83 に示すが、三脚に取り付けた状態で、指定されたエリアでハイパースペクトルカメラ画像を 20 度の角度で撮影することから始まった。その後、ハイパースペクトルデータを読み込み、Python スクリプトを使用して鳥瞰図画像を変換した。コードを実行する前に Python スクリプトで更新する必要があったのは、

スクリプトが自動的にカメラデータを収集するため、角度情報のみとなる。RGB 画像に対して最初に鳥瞰変換が適用され、次にハイパースペクトルデータを作成するために RGB 画像に適用された変換行列を使用して他のバンド画像が変更された。

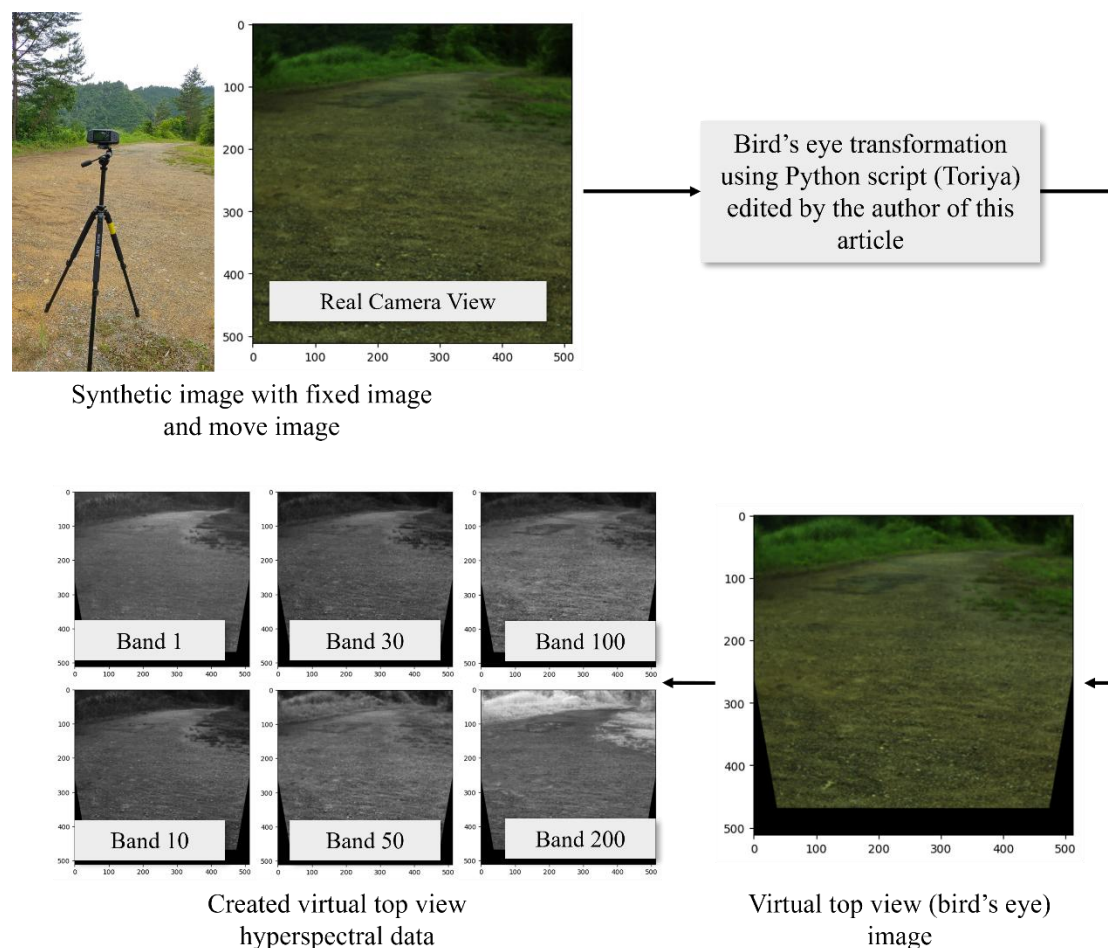


Figure 83 Results of the bird eye transformation for hyperspectral data.

6.3.2.1. 水平画像レジストレーション

Figure 84 に見られるように、1 台のカメラで複数のバンド・ビューを取得するのではなく、本研究で利用したドローン・カメラは、各カメラに特定のバンドが割り当てられるように構成されている。この場合、合計 5 つの波長と RGB 画像を取得できるが、6 つのシングルバンドカメラがある。そのため、同じ被写体を撮影しても、各波長の水平方向の位置は微妙に変化する。これをそのままデータキューブに入れておくと、正常なスペクトル情報を取得することができない。水平方向の位置ずれは、画像レジストレーションによって補正された。Figure 84 に示すように、最初に同じシーンのスペクトル画像を読み込み、特徴点を検出した。その後、これらの画像を用いて画像レジストレーションを行い、水平方向のずれを修正したデータキューブを作成した。生成されたデータキューブを調べるには、Hyperspectral Viewer を使用することができる。

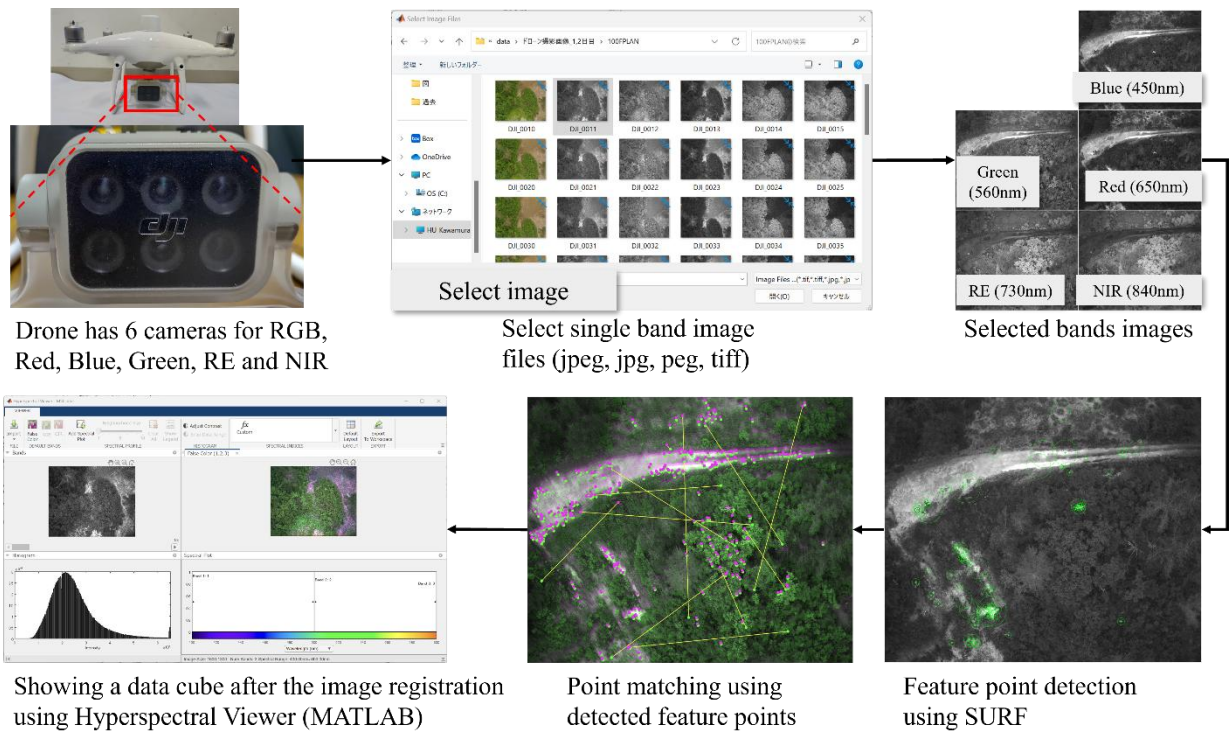


Figure 84 Image registration for drone camera images.

6.3.2.2. 垂直画像レジストレーション

Figure 85 で示すように、鳥瞰視点への変換後の画像はより高い高度で撮影された画像と一致するように手動で特徴点を選択した。高度差が大きいため、特徴点の自動抽出は不可能であったため、目視で特徴点を抽出した。Figure 85 に画像登録の結果を示す。低高度から取得した画像の空間分解能を維持したまま、固定画像上の対応する座標に移動画像をフィッティングすることで、高高度から収集したスペクトル画像と一致するように画像登録が計算された。位置合わせされたスペクトル画像の概念図を Figure 86 に示す。

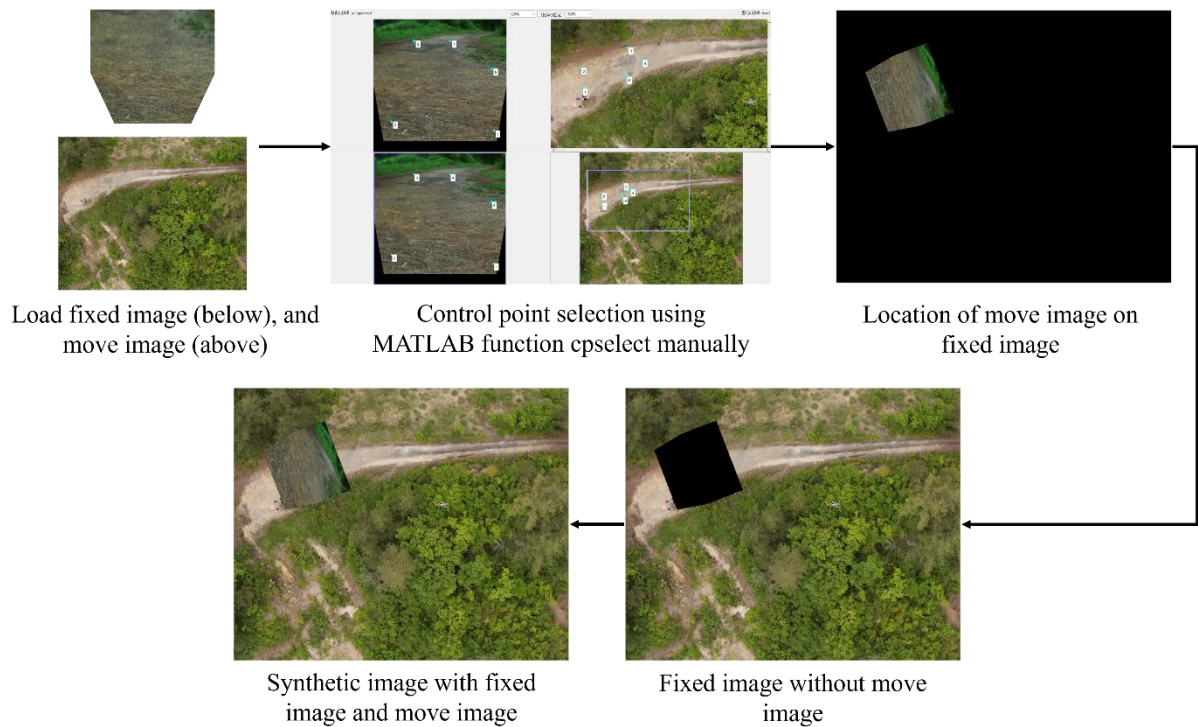


Figure 85 Control points selection shows as False RGB images.

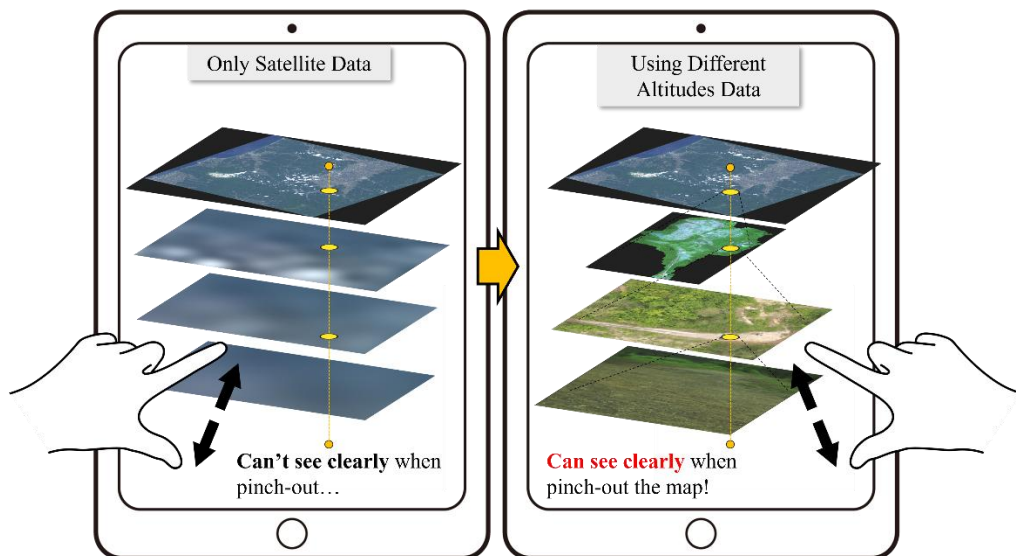


Figure 86 An overview of the result showed as False RGB images.

6.4. 今後の課題

本章は、異高度のスペクトル画像に対するレジストレーション技術の提案であるため、構築されたスペクトル画像は汚染土壌領域の探索には用いられていない。今後は、本技術と機械学習を組み合わせ、汚染地域の特定を行う予定である。さらに、本技術は資源探査にも活用できる可能性がある。現在は地表に露出している鉱物資源に限定されているが、この技術を用いることで、従来よりも包括的な調査が可能になると期待される。これらの研究を進めるためには、地質学的・鉱物学的データの収集が不可欠である。

その後の研究は、このデータの収集と、この技術の有望な応用の調査と並行して行われる。

6.5. 異高度スペクトルデータのレジストレーションに関する結論

本研究では、リモートセンシングの空間分解能の不足に関連する問題のいくつかを解決できる可能性のあるスペクトル画像レジストレーション法を調査した。また、この種のシステムの作成と管理プロセスも研究に含まれた。異なる高度で取得されたスペクトルデータを検査できるシステムの構築が本研究の目的である。秋田県の閉山鉱山を調査対象とした。研究は、(1)フィールド調査とラボテストによるシステムの適用、(2)さまざまな画像レジストレーション方法の作成、の2つのセクションに分かれている。

(1)では、デジタルツインの基盤として Structure from Motion を採用し、UAV データから鉱山跡の3Dモデルを作成した。(2)では、現地調査時に斜め方向から取得したスペクトルデータを鳥瞰図画像に変換し、高高度から取得したデータと画像登録することで、局所的で解像度の高いスペクトルデータを作成した。我々は、上記の2つの用語を統合することにより、様々な高度からのスペクトルデータを同一のデジタルプラットフォーム上で同期させる戦略を提案した。

これにより、様々な高度から得られたスペクトル画像の空間分解能が向上し、これまで断続的なデータリンクに限られていた様々な高度からのスペクトルデータ群の横断的な解析が可能となった。鉱山開発による廃棄鉱物の重金属汚染は地球規模の深刻な問題であり、本研究はその環境評価を容易にする可能性を示している。

7. 結論

本研究では、ハイパースペクトルイメージングと機械学習を活用した重金属鉱物検出技術の最適化を目指し、鉱山操業における環境保全に貢献する新たな方法を提案した。特に、ヒ素を含む鉱物の同定と検出に焦点を当てた技術を開発した。以下に、本研究を通じて得られた主要な成果を総括する。

7.1. 機械学習アルゴリズムの比較と最適化

2 章では、機械学習モデルの比較実験を行い、10 種類の学習モデルを使用して異なるハイパースペクトルデータセットに対する分類精度を評価した。結果として、浅層ニューラルネットワーク (NN) とサポートベクターマシン (SVM) が高い性能を示し、特に CNN は計算負荷が大きいため、中程度の性能にとどまった。この実験は、適切な機械学習アルゴリズムの選定がデータセットに依存することを明確にし、実運用における最適な解析手法を選定する際の指針を提供した。

7.2. AI ツールによる解析の簡便化

3 章で紹介した APiS ツールは、ユーザフレンドリなインターフェースを提供し、専門知識がないユーザでもハイパースペクトルデータの解析を容易に実行できる環境を整えた。このツールは、機械学習の高度な解析をコーディングなしで実行可能にし、分類、回帰、前処理など多様な機能を備えており、鉱山業界やその他の分野での導入に向けた大きな一歩となる。

7.3. 鉱物種・粒径の同定フレームワークの開発

4 章では、深層学習を活用してハイパースペクトルデータから鉱物の種類や粒径を高精度で識別するシステムを開発した。従来の RGB 画像解析と比較して、91.9%という高い分類精度を達成し、ハイパースペクトルデータの優位性を証明した。さらに、誤分類の原因を分析するために Grad-CAM を用いて CNN 出力の逆解析を行い、識別精度の改善に繋がる知見を得ることができた。

7.4. ハイパースペクトルイメージングと深層学習を用いた次元削減・判定根拠可視化アルゴリズムの開発：硫砒銅鉱含有鉱石を用いたケーススタディ

5 章では、近傍成分分析 (NCA)、訓練済みの CNN モデルの重み解析を組み合わせることで判断根拠の可視化を行い、それら特定された重要波長帯を用いることで鉱物品位推定を効率的に行う方法を提案した。この手法により、データ取得および解析速度の向上が実現した。特に、ヒ素を含有する鉱石粉体の検出においては、重要な波長帯を絞り込むことが精度向上に繋がり、低コストのマルチスペクトルカメラを用いることで、鉱石粉体同定の実用性がさらに高まる可能性が示された。

7.5. リモートセンシングによる高精度な環境評価

6 章では、異なる高度で取得したスペクトルデータを統合するための画像レジストレーション技術を提案した。この技術により、空間分解能が向上し、鉱山開発による重金属汚染を高精度で監視することが可能となった。デジタルツイン技術を基盤にした 3D モデルの作成とスペクトルデータの同期により、鉱山環境のより詳細な評価が可能となり、環境保全に向けた新たなアプローチを提供する。

本研究を通じて、ハイパースペクトルイメージングと機械学習を組み合わせることで、鉱物同定や重金属汚染のモニタリングにおける手法を提案し、環境調和型鉱山操業を推進するための有力なツールとなることを示した。今後の展開としては、さらに多様なデータセットに対する適用や、実際の鉱山現場での導入を進め、持続可能な資源開発への貢献を目指すことが重要である。

参考文献

- [1] 公害等調整委員会事務局総務課企画法規係, “明治の公害と公害紛争処理制度について,” 2018.
- [2] 金井徹, “I-3 銅鉍害の歴史とその対策,” *Japanese Society of Soil Science and Plant Nutrition*.
- [3] K. Aoshima, “イタイイタイ病をめぐる最近の知見,” *衛生化学*, vol. 43, no. 6, pp. 317–330, 1997, doi: 10.1248/JHS1956.43.317.
- [4] “富山県 / イタイイタイ病とは.” Accessed: Dec. 11, 2024. [Online]. Available: <https://www.pref.toyama.jp/1291/kurashi/kenkou/iryuu/1291/100025/100026.html>
- [5] “宮崎県：高千穂町土呂久地区における公害健康被害（慢性砒素中毒症）について.” Accessed: Dec. 11, 2024. [Online]. Available: <https://www.pref.miyazaki.lg.jp/kankyokanri/kurashi/shizen/toroku.html>
- [6] 川原一之, “土呂久からバングラデシュへー草の根国際協力の実践ー,” *環境社会学研究*, vol. 6, pp. 55–65, 2000, doi: 10.24779/jpkankyo.6.0_55.
- [7] S. A. Anka, “Lead Poisoning in Zamfara State Nigeria: Effects on Environmental Health,” in *Poisoning*, F. A. Badria and K. Palaniappan, Eds., Rijeka: IntechOpen, 2024, p. Ch. 4. doi: 10.5772/intechopen.112909.
- [8] L. Yi-Chun *et al.*, “Childhood Lead Poisoning Associated with Gold Ore Processing: a Village-Level Investigation—Zamfara State, Nigeria, October–November 2010,” *Environ Health Perspect*, vol. 120, no. 10, pp. 1450–1455, Oct. 2012, doi: 10.1289/ehp.1104793.
- [9] L. H. Silva Rotta *et al.*, “The 2019 Brumadinho tailings dam collapse: Possible cause and impacts of the worst human and environmental disaster in Brazil,” *International Journal of Applied Earth Observation and Geoinformation*, vol. 90, p. 102119, 2020, doi: <https://doi.org/10.1016/j.jag.2020.102119>.
- [10] “Deadly asbestos takes toll years after kids exposed : Archive Page : The University of Western Australia.” Accessed: Dec. 11, 2024. [Online]. Available: <https://www.news.uwa.edu.au/archive/201209044978/research/deadly-asbestos-takes-toll-years-after-kids-exposed/>
- [11] D. A. Spadaro *et al.*, “Probabilistic risk assessment of mine-derived copper in the Ok Tedi/Fly River, Papua New Guinea,” *Science of The Total Environment*, vol. 810, p. 151219, 2022, doi: <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2021.151219>.
- [12] J. Fatalla, “The 1996 Marcopper Mining Disaster in Marinduque: Five Decades of Social Injustice and Neglect,” pp. 11–22, May 2019.
- [13] “The Baia Mare tailings dam failure, 2000 – Fondazione Stava 1985 Onlus.” Accessed: Dec. 11, 2024. [Online]. Available: <https://www.stava1985.it/tailings-spill-accident-in-baia-mare-romania-2000/?lang=en>
- [14] “EPA Response to Kingston TVA Coal Ash Spill | US EPA.” Accessed: Dec. 11, 2024. [Online]. Available: <https://www.epa.gov/tn/epa-response-kingston-tva-coal-ash-spill>
- [15] J. J. Leppänen, J. Weckström, and A. Korhola, “Multiple mining impacts induce widespread changes

- in ecosystem dynamics in a boreal lake,” *Sci Rep*, vol. 7, no. 1, p. 10581, 2017, doi: 10.1038/s41598-017-11421-8.
- [16] P. Byrne *et al.*, “Water quality impacts and river system recovery following the 2014 Mount Polley mine tailings dam spill, British Columbia, Canada,” *Applied Geochemistry*, vol. 91, pp. 64–74, 2018, doi: <https://doi.org/10.1016/j.apgeochem.2018.01.012>.
- [17] Y. O. Van Horne *et al.*, “Impacts to Diné activities with the San Juan River after the Gold King Mine Spill,” *J Expo Sci Environ Epidemiol*, vol. 31, no. 5, pp. 852–866, 2021, doi: 10.1038/s41370-021-00290-z.
- [18] F. R. Segura *et al.*, “Potential risks of the residue from Samarco’s mine dam burst (Bento Rodrigues, Brazil),” *Environmental Pollution*, vol. 218, pp. 813–825, 2016, doi: <https://doi.org/10.1016/j.envpol.2016.08.005>.
- [19] “Fly ash slurry in Singrauli contaminates water reservoir after taking lives and homes.” Accessed: Dec. 11, 2024. [Online]. Available: <https://india.mongabay.com/2020/04/fly-ash-slurry-in-singrauli-contaminates-water-reservoir-after-taking-lives-and-homes/>
- [20] N. B. R. Monteiro, E. A. da Silva, and J. M. Moita Neto, “Sustainable development goals in mining,” *J Clean Prod*, vol. 228, pp. 509–520, 2019, doi: <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2019.04.332>.
- [21] D. H. Brainard, “Color, pattern, and the retinal cone mosaic,” *Curr Opin Behav Sci*, vol. 30, pp. 41–47, 2019, doi: <https://doi.org/10.1016/j.cobeha.2019.05.005>.
- [22] B. S. Gundlach *et al.*, “Design considerations for the enhancement of human color vision by breaking binocular redundancy,” *Sci Rep*, vol. 8, no. 1, p. 11971, 2018, doi: 10.1038/s41598-018-30403-y.
- [23] M. A. Calin, S. V. Parasca, D. Savastru, and D. Manea, “Hyperspectral Imaging in the Medical Field: Present and Future,” *Appl Spectrosc Rev*, vol. 49, no. 6, pp. 435–447, Aug. 2014, doi: 10.1080/05704928.2013.838678.
- [24] M. E. Martin *et al.*, “Development of an Advanced Hyperspectral Imaging (HSI) System with Applications for Cancer Detection,” *Ann Biomed Eng*, vol. 34, no. 6, pp. 1061–1068, 2006, doi: 10.1007/s10439-006-9121-9.
- [25] G. Lu, L. V Halig, D. Wang, X. Qin, Z. G. Chen, and B. Fei, “Spectral-spatial classification for noninvasive cancer detection using hyperspectral imaging,” *J Biomed Opt*, vol. 19, no. 10, p. 106004, Oct. 2014, doi: 10.1117/1.JBO.19.10.106004.
- [26] G. Lu *et al.*, “Detection of Head and Neck Cancer in Surgical Specimens Using Quantitative Hyperspectral Imaging,” *Clinical Cancer Research*, vol. 23, no. 18, pp. 5426–5436, Sep. 2017, doi: 10.1158/1078-0432.CCR-17-0906.
- [27] S.-E. Qian, “Hyperspectral Satellites, Evolution, and Development History,” *IEEE J Sel Top Appl Earth Obs Remote Sens*, vol. 14, pp. 7032–7056, 2021, doi: 10.1109/JSTARS.2021.3090256.
- [28] Z. He *et al.*, “Mars Mineralogical Spectrometer (MMS) on the Tianwen-1 Mission,” *Space Sci Rev*, vol. 217, no. 2, p. 27, 2021, doi: 10.1007/s11214-021-00804-z.
- [29] H. M. Dierssen *et al.*, “Living up to the Hype of Hyperspectral Aquatic Remote Sensing: Science, Resources and Outlook,” *Front Environ Sci*, vol. 9, 2021, [Online]. Available:

<https://www.frontiersin.org/journals/environmental-science/articles/10.3389/fenvs.2021.649528>

- [30] B. Liu *et al.*, “Underwater Hyperspectral Imaging Technology and Its Applications for Detecting and Mapping the Seafloor: A Review,” *Sensors*, vol. 20, no. 17, 2020, doi: 10.3390/s20174962.
- [31] A. Benelli, C. Cevoli, and A. Fabbri, “In-field hyperspectral imaging: An overview on the ground-based applications in agriculture,” *Journal of Agricultural Engineering*, vol. 51, no. 3, pp. 129–139, Sep. 2020, doi: 10.4081/jae.2020.1030.
- [32] C. Wang *et al.*, “A review of deep learning used in the hyperspectral image analysis for agriculture,” *Artif Intell Rev*, vol. 54, no. 7, pp. 5205–5253, 2021, doi: 10.1007/s10462-021-10018-y.
- [33] L. M. Dale *et al.*, “Hyperspectral Imaging Applications in Agriculture and Agro-Food Product Quality and Safety Control: A Review,” *Appl Spectrosc Rev*, vol. 48, no. 2, pp. 142–159, Mar. 2013, doi: 10.1080/05704928.2012.705800.
- [34] C. Cucci, J. K. Delaney, and M. Picollo, “Reflectance Hyperspectral Imaging for Investigation of Works of Art: Old Master Paintings and Illuminated Manuscripts,” *Acc Chem Res*, vol. 49, no. 10, pp. 2070–2079, Oct. 2016, doi: 10.1021/acs.accounts.6b00048.
- [35] S. Legrand *et al.*, “Examination of historical paintings by state-of-the-art hyperspectral imaging methods: from scanning infra-red spectroscopy to computed X-ray laminography,” *Herit Sci*, vol. 2, no. 1, p. 13, 2014, doi: 10.1186/2050-7445-2-13.
- [36] Y. Xu, L. Zhang, B. Du, and L. Zhang, “Hyperspectral Anomaly Detection Based on Machine Learning: An Overview,” *IEEE J Sel Top Appl Earth Obs Remote Sens*, vol. 15, pp. 3351–3364, 2022, doi: 10.1109/JSTARS.2022.3167830.
- [37] M. Shimoni, R. Haelterman, and C. Perneel, “Hypersectral Imaging for Military and Security Applications: Combining Myriad Processing and Sensing Techniques,” *IEEE Geosci Remote Sens Mag*, vol. 7, no. 2, pp. 101–117, 2019, doi: 10.1109/MGRS.2019.2902525.
- [38] N. C. White, “MINING GEOLOGY | Exploration,” in *Encyclopedia of Geology*, R. C. Selley, L. R. M. Cocks, and I. R. Plimer, Eds., Oxford: Elsevier, 2005, pp. 613–623. doi: <https://doi.org/10.1016/B0-12-369396-9/00239-2>.
- [39] A. M. Eldosouky *et al.*, “6 - Geological data for mineral exploration,” in *Geospatial Analysis Applied to Mineral Exploration*, A. B. Pour, M. Parsa, and A. M. Eldosouky, Eds., Elsevier, 2023, pp. 233–277. doi: <https://doi.org/10.1016/B978-0-323-95608-6.00006-8>.
- [40] B. Mukerji, “Subchapter 4.1 - Modern techniques for identifying mineralization in virgin area,” in *Innovative Exploration Methods for Minerals, Oil, Gas, and Groundwater for Sustainable Development*, A. K. Moitra, J. R. Kayal, B. Mukerji, J. Bhattacharya, and A. K. Das, Eds., Elsevier, 2022, pp. 297–309. doi: <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-823998-8.00014-4>.
- [41] S. Peyghambari and Y. Zhang, “Hyperspectral remote sensing in lithological mapping, mineral exploration, and environmental geology: an updated review,” <https://doi.org/10.1117/1.JRS.15.031501>, vol. 15, no. 3, p. 031501, Jul. 2021, doi: 10.1117/1.JRS.15.031501.
- [42] A. Guha, “15 - Mineral exploration using hyperspectral data,” in *Hyperspectral Remote Sensing*, P.

- C. Pandey, P. K. Srivastava, H. Balzter, B. Bhattacharya, and G. P. Petropoulos, Eds., Elsevier, 2020, pp. 293–318. doi: <https://doi.org/10.1016/B978-0-08-102894-0.00012-7>.
- [43] E. Kozan and S. Q. Liu, “A new open-pit multi-stage mine production timetabling model for drilling, blasting and excavating operations,” *Mining Technology*, vol. 125, no. 1, pp. 47–53, Mar. 2016, doi: 10.1179/1743286315Y.00000000031.
- [44] E. Kozan and S. Q. Liu, “An operational-level multi-stage mine production timetabling model for optimally synchronising drilling, blasting and excavating operations,” *Int J Min Reclam Environ*, vol. 31, no. 7, pp. 457–474, Oct. 2017, doi: 10.1080/17480930.2016.1160818.
- [45] T. H. Kurz, S. J. Buckley, and J. A. Howell, “Close-range hyperspectral imaging for geological field studies: workflow and methods,” *Int J Remote Sens*, vol. 34, no. 5, pp. 1798–1822, Mar. 2013, doi: 10.1080/01431161.2012.727039.
- [46] S. Boubanga-Tombet *et al.*, “Thermal Infrared Hyperspectral Imaging for Mineralogy Mapping of a Mine Face,” *Remote Sens (Basel)*, vol. 10, no. 10, 2018, doi: 10.3390/rs10101518.
- [47] D. Hodouin, S.-L. Jämsä-Jounela, M. T. Carvalho, and L. Bergh, “State of the art and challenges in mineral processing control,” *Control Eng Pract*, vol. 9, no. 9, pp. 995–1005, 2001, doi: [https://doi.org/10.1016/S0967-0661\(01\)00088-0](https://doi.org/10.1016/S0967-0661(01)00088-0).
- [48] S. K. Haldar, “Chapter 13 - Mineral Processing,” in *Mineral Exploration (Second Edition)*, S. K. Haldar, Ed., Elsevier, 2018, pp. 259–290. doi: <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-814022-2.00013-7>.
- [49] S. K. Haldar, “Chapter 11 - Hazards of minerals—rocks and sustainable development,” in *Introduction to Mineralogy and Petrology (Second Edition)*, S. K. Haldar, Ed., Oxford: Elsevier, 2020, pp. 377–410. doi: <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-820585-3.00011-9>.
- [50] E. S. Santos, D. Arán, M. M. Abreu, and A. de Varennes, “Chapter 8 - Engineered Soils Using Amendments for In Situ Rehabilitation of Mine Lands,” in *Bio-Geotechnologies for Mine Site Rehabilitation*, M. N. V. Prasad, P. J. de C. Favas, and S. K. Maiti, Eds., Elsevier, 2016, pp. 131–146. doi: <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-812986-9.00008-7>.
- [51] R. Booysen *et al.*, “Towards Multiscale and Multisource Remote Sensing Mineral Exploration Using RPAS: A Case Study in the Lofdal Carbonatite-Hosted REE Deposit, Namibia,” *Remote Sens (Basel)*, vol. 11, no. 21, 2019, doi: 10.3390/rs11212500.
- [52] I. Dumke *et al.*, “First hyperspectral imaging survey of the deep seafloor: High-resolution mapping of manganese nodules,” *Remote Sens Environ*, vol. 209, pp. 19–30, 2018, doi: <https://doi.org/10.1016/j.rse.2018.02.024>.
- [53] Y. Tan, L. Lu, L. Bruzzone, R. Guan, Z. Chang, and C. Yang, “Hyperspectral Band Selection for Lithologic Discrimination and Geological Mapping,” *IEEE J Sel Top Appl Earth Obs Remote Sens*, vol. 13, pp. 471–486, 2020, doi: 10.1109/JSTARS.2020.2964000.
- [54] E. M. Guerra Prado, C. R. de Souza Filho, and E. J. Muico Carranza, “Ore-Grade Estimation from Hyperspectral Data Using Convolutional Neural Networks: A Case Study at the Olympic Dam Iron Oxide Copper-Gold Deposit, Australia,” *Economic Geology*, vol. 118, no. 8, pp. 1899–1921, Dec.

2023, doi: 10.5382/econgeo.5023.

- [55] R. J. Murphy, Z. Taylor, S. Schneider, and J. Nieto, "Mapping clay minerals in an open-pit mine using hyperspectral and LiDAR data," *Eur J Remote Sens*, vol. 48, no. 1, pp. 511–526, Jan. 2015, doi: 10.5721/EuJRS20154829.
- [56] N. Okada, Y. Maekawa, N. Owada, K. Haga, A. Shibayama, and Y. Kawamura, "Automated Identification of Mineral Types and Grain Size Using Hyperspectral Imaging and Deep Learning for Mineral Processing," *Minerals*, vol. 10, no. 9, 2020, doi: 10.3390/min10090809.
- [57] C. L. Johnson, D. A. Browning, and N. E. Pendock, "Hyperspectral Imaging Applications to Geometallurgy: Utilizing Blast Hole Mineralogy to Predict Au-Cu Recovery and Throughput at the Phoenix Mine, Nevada," *Economic Geology*, vol. 114, no. 8, pp. 1481–1494, Dec. 2019, doi: 10.5382/econgeo.4684.
- [58] S. Leroy and E. Pirard, "Mineral recognition of single particles in ore slurry samples by means of multispectral image processing," *Miner Eng*, vol. 132, pp. 228–237, 2019, doi: <https://doi.org/10.1016/j.mineng.2018.12.009>.
- [59] L. Windrim, A. Melkumyan, R. J. Murphy, A. Chlingaryan, and R. Leung, "Unsupervised ore/waste classification on open-cut mine faces using close-range hyperspectral data," *Geoscience Frontiers*, vol. 14, no. 4, p. 101562, 2023, doi: <https://doi.org/10.1016/j.gsf.2023.101562>.
- [60] B. Zhang, D. Wu, L. Zhang, Q. Jiao, and Q. Li, "Application of hyperspectral remote sensing for environment monitoring in mining areas," *Environ Earth Sci*, vol. 65, no. 3, pp. 649–658, 2012, doi: 10.1007/s12665-011-1112-y.
- [61] J. Levesque and K. Staenz, "A method for monitoring mine tailings revegetation using hyperspectral remote sensing," in *IGARSS 2004. 2004 IEEE International Geoscience and Remote Sensing Symposium*, 2004, p. 578. doi: 10.1109/IGARSS.2004.1369092.
- [62] M. Gastauer, W. R. Nascimento, C. F. Caldeira, S. J. Ramos, P. W. M. Souza-Filho, and J.-B. Féret, "Spectral diversity allows remote detection of the rehabilitation status in an Amazonian iron mining complex," *International Journal of Applied Earth Observation and Geoinformation*, vol. 106, p. 102653, 2022, doi: <https://doi.org/10.1016/j.jag.2021.102653>.
- [63] S. Choudhury and A. Bhowal, "Comparative analysis of machine learning algorithms along with classifiers for network intrusion detection," in *2015 International Conference on Smart Technologies and Management for Computing, Communication, Controls, Energy and Materials (ICSTM)*, 2015, pp. 89–95. doi: 10.1109/ICSTM.2015.7225395.
- [64] D. Chicco and G. Jurman, "An Invitation to Greater Use of Matthews Correlation Coefficient in Robotics and Artificial Intelligence," *Front Robot AI*, vol. 9, 2022, [Online]. Available: <https://www.frontiersin.org/journals/robotics-and-ai/articles/10.3389/frobt.2022.876814>
- [65] H. Shen, H. Jin, Á. A. Cabrera, A. Perer, H. Zhu, and J. I. Hong, "Designing Alternative Representations of Confusion Matrices to Support Non-Expert Public Understanding of Algorithm Performance," *Proc. ACM Hum.-Comput. Interact.*, vol. 4, no. CSCW2, Oct. 2020, doi: 10.1145/3415224.

- [66] J. Peng, E. C. Jury, P. Dönnies, and C. Ciurtin, "Machine Learning Techniques for Personalised Medicine Approaches in Immune-Mediated Chronic Inflammatory Diseases: Applications and Challenges," *Front Pharmacol*, vol. 12, 2021, [Online]. Available: <https://www.frontiersin.org/journals/pharmacology/articles/10.3389/fphar.2021.720694>
- [67] K. K. Jha, R. Jha, A. K. Jha, M. A. M. Hassan, S. K. Yadav, and T. Mahesh, "A Brief Comparison On Machine Learning Algorithms Based On Various Applications: A Comprehensive Survey," in *2021 IEEE International Conference on Computation System and Information Technology for Sustainable Solutions (CSITSS)*, 2021, pp. 1–5. doi: 10.1109/CSITSS54238.2021.9683524.
- [68] K. Arulkumaran, M. P. Deisenroth, M. Brundage, and A. A. Bharath, "Deep Reinforcement Learning: A Brief Survey," *IEEE Signal Process Mag*, vol. 34, no. 6, pp. 26–38, 2017, doi: 10.1109/MSP.2017.2743240.
- [69] W. Cheng and E. Hüllermeier, "Combining instance-based learning and logistic regression for multilabel classification," *Mach Learn*, vol. 76, no. 2, pp. 211–225, 2009, doi: 10.1007/s10994-009-5127-5.
- [70] X. Huang and W. Pan, "Linear regression and two-class classification with gene expression data," *Bioinformatics*, vol. 19, no. 16, pp. 2072–2078, Nov. 2003, doi: 10.1093/bioinformatics/btg283.
- [71] M. A. A. Andrew L. Mular, "Design and Installation of Concentration and Dewatering Circuits".
- [72] C. Robben and J.-A. Dumont, "Sensor-based ore sorting methodology investigation applied to gold ores," Oct. 2017.
- [73] C. A. Perez *et al.*, "Ore grade estimation by feature selection and voting using boundary detection in digital image analysis," *Int J Miner Process*, vol. 101, no. 1, pp. 28–36, 2011, doi: <https://doi.org/10.1016/j.minpro.2011.07.008>.
- [74] B. Han *et al.*, "Development of copper recovery process from flotation tailings by a combined method of high-pressure leaching-solvent extraction," *J Hazard Mater*, vol. 352, pp. 192–203, 2018, doi: <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2018.03.014>.
- [75] M. Mokmeli, "Pre feasibility study in hydrometallurgical treatment of low-grade chalcopyrite ores from Sarcheshmeh copper mine," *Hydrometallurgy*, vol. 191, p. 105215, 2020, doi: <https://doi.org/10.1016/j.hydromet.2019.105215>.
- [76] B. Schulz, G. Merker, and J. Gutzmer, "Automated SEM Mineral Liberation Analysis (MLA) with Generically Labelled EDX Spectra in the Mineral Processing of Rare Earth Element Ores," *Minerals*, vol. 9, no. 9, 2019, doi: 10.3390/min9090527.
- [77] C. Liu, M. Li, Y. Zhang, S. Han, and Y. Zhu, "An Enhanced Rock Mineral Recognition Method Integrating a Deep Learning Model and Clustering Algorithm," *Minerals*, vol. 9, no. 9, 2019, doi: 10.3390/min9090516.
- [78] W. Zhang, W. Sun, Y. Hu, J. Cao, and Z. Gao, "Selective Flotation of Pyrite from Galena Using Chitosan with Different Molecular Weights," *Minerals*, vol. 9, no. 9, 2019, doi: 10.3390/min9090549.
- [79] N. Mezned, S. Abdeljaoued, and M. R. Boussema, "ASTER Multispectral Imagery for Spectral Unmixing based Mine Tailing cartography in the North of Tunisia," 2007. [Online]. Available:

<https://api.semanticscholar.org/CorpusID:14167518>

- [80] S. Chabrilat, A. Goetz, H. Olsen, and L. Krosley, "Field and Imaging spectrometry For Identification and Mapping of Expansive Soils," 2002, pp. 87–109. doi: 10.1007/978-0-306-47578-8_4.
- [81] C. Robben and H. Wotruba, "Sensor-Based Ore Sorting Technology in Mining—Past, Present and Future," *Minerals* 2019, Vol. 9, Page 523, vol. 9, no. 9, p. 523, Aug. 2019, doi: 10.3390/MIN9090523.
- [82] F. F. Sabins, "Remote sensing for mineral exploration," *Ore Geol Rev*, vol. 14, pp. 157–183, 1999, [Online]. Available: <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:128486696>
- [83] S. C. Dominy, L. O'Connor, A. Parbhakar-Fox, H. J. Glass, and S. Purevgerel, "Geometallurgy—A Route to More Resilient Mine Operations," *Minerals*, vol. 8, no. 12, 2018, doi: 10.3390/min8120560.
- [84] P.-H. Koch and J. Rosenkranz, "Sequential decision-making in mining and processing based on geometallurgical inputs," *Miner Eng*, vol. 149, p. 106262, 2020, doi: <https://doi.org/10.1016/j.mineng.2020.106262>.
- [85] S. Farooq and H. Govil, "Mapping Regolith and Gossan for Mineral Exploration in the Eastern Kumaon Himalaya, India using hyperion data and object oriented image classification," *Advances in Space Research*, vol. 53, no. 12, pp. 1676–1685, 2014, doi: <https://doi.org/10.1016/j.asr.2013.04.002>.
- [86] L. Zhang, Z. He, and Y. Liu, "Deep object recognition across domains based on adaptive extreme learning machine," *Neurocomputing*, vol. 239, pp. 194–203, 2017, doi: <https://doi.org/10.1016/j.neucom.2017.02.016>.
- [87] Z. Zhong, L. Jin, and Z. Xie, "High performance offline handwritten Chinese character recognition using GoogLeNet and directional feature maps," in *2015 13th International Conference on Document Analysis and Recognition (ICDAR)*, 2015, pp. 846–850. doi: 10.1109/ICDAR.2015.7333881.
- [88] N. Okada *et al.*, "Advanced mineralogical classification and concentration estimation in mining with MATLAB-powered hyper-spectral imaging and machine learning," *Int J Min Reclam Environ*, Jun. 2024, doi: 10.1080/17480930.2024.2360743.
- [89] N. Okada *et al.*, "Optimizing multi-spectral ore sorting incorporating wavelength selection utilizing neighborhood component analysis for effective arsenic mineral detection," *Scientific Reports* 2024 14:1, vol. 14, no. 1, pp. 1–21, May 2024, doi: 10.1038/s41598-024-62166-0.
- [90] N. Okada *et al.*, "APiS (AI powered intelligence spectrum analyser): hyperspectral imaging machine learning analyser app for mineral processing," *Int J Min Reclam Environ*, pp. 1–27, doi: 10.1080/17480930.2024.2410041.
- [91] M. A. A. Andrew L. Mular, "Design and Installation of Concentration and Dewatering Circuits".
- [92] J. Chen, X. J. Guo, and H. Li, "Implementation and practice of an integrated process to recover copper from low grade ore at Zijinshan mine," *Hydrometallurgy*, vol. 195, p. 105394, 2020, doi: <https://doi.org/10.1016/j.hydromet.2020.105394>.
- [93] R. Padilla, O. Jerez, and M. C. Ruiz, "Kinetics of the pressure leaching of enargite in FeSO₄–H₂SO₄–O₂ media," *Hydrometallurgy*, vol. 158, pp. 49–55, 2015, doi:

<https://doi.org/10.1016/j.hydromet.2015.09.029>.

- [94] C. Szegedy *et al.*, “Going deeper with convolutions,” in *2015 IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR)*, Los Alamitos, CA, USA: IEEE Computer Society, Jun. 2015, pp. 1–9. doi: 10.1109/CVPR.2015.7298594.
- [95] K. Simonyan and A. Zisserman, “Very Deep Convolutional Networks for Large-Scale Image Recognition,” *3rd International Conference on Learning Representations, ICLR 2015 - Conference Track Proceedings*, Sep. 2014, Accessed: Dec. 10, 2024. [Online]. Available: <https://arxiv.org/abs/1409.1556v6>
- [96] E. Arzuaga-Cruz *et al.*, “A MATLAB toolbox for hyperspectral image analysis,” *International Geoscience and Remote Sensing Symposium (IGARSS)*, vol. 7, pp. 4839–4842, 2004, doi: 10.1109/IGARSS.2004.1370246.
- [97] Mathworks, “Hyperspectral Image Processing.” Accessed: Dec. 10, 2024. [Online]. Available: <https://www.mathworks.com/help/images/hyperspectral-image-processing.html>
- [98] H. Feng *et al.*, “An integrated hyperspectral imaging and genome-wide association analysis platform provides spectral and genetic insights into the natural variation in rice,” *Scientific Reports* 2017 7:1, vol. 7, no. 1, pp. 1–10, Jun. 2017, doi: 10.1038/s41598-017-04668-8.
- [99] A. Islam ElManawy, D. Sun, A. Abdalla, Y. Zhu, and H. Cen, “HSI-PP: A flexible open-source software for hyperspectral imaging-based plant phenotyping,” *Comput Electron Agric*, vol. 200, p. 107248, Sep. 2022, doi: 10.1016/J.COMPAG.2022.107248.
- [100] N. Mobaraki and J. M. Amigo, “HYPER-Tools. A graphical user-friendly interface for hyperspectral image analysis,” *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, vol. 172, pp. 174–187, Jan. 2018, doi: 10.1016/J.CHEMOLAB.2017.11.003.
- [101] I. H. Sarker, “Machine Learning: Algorithms, Real-World Applications and Research Directions,” *SN Comput Sci*, vol. 2, no. 3, pp. 1–21, May 2021, doi: 10.1007/S42979-021-00592-X/FIGURES/11.
- [102] N. Quadrianto and W. L. Buntine, “Regression,” *Encyclopedia of Machine Learning*, pp. 838–842, 2011, doi: 10.1007/978-0-387-30164-8_710.
- [103] T. T. Teoh and Z. Rong, “Classification,” pp. 183–211, 2022, doi: 10.1007/978-981-16-8615-3_11.
- [104] S. B. Kotsiantis, “Decision trees: A recent overview,” *Artif Intell Rev*, vol. 39, no. 4, pp. 261–283, Apr. 2013, doi: 10.1007/S10462-011-9272-4/METRICS.
- [105] “Pattern Recognition and Machine Learning,” *Pattern Recognition and Machine Learning*, Dec. 2006, doi: 10.1007/978-0-387-45528-0.
- [106] T. Cooke, “Two variations on fisher’s linear discriminant for pattern recognition,” *IEEE Trans Pattern Anal Mach Intell*, vol. 24, no. 2, pp. 268–273, Feb. 2002, doi: 10.1109/34.982904.
- [107] T. G. Nick and K. M. Campbell, “Logistic Regression,” *Methods Mol Biol*, vol. 404, pp. 273–301, 2007, doi: 10.1007/978-1-59745-530-5_14.
- [108] F. J. Yang, “An implementation of naive bayes classifier,” *Proceedings - 2018 International Conference on Computational Science and Computational Intelligence, CSCI 2018*, pp. 301–306, Dec. 2018, doi: 10.1109/CSCI46756.2018.00065.

- [109] S. Suthaharan, "Support Vector Machine," pp. 207–235, 2016, doi: 10.1007/978-1-4899-7641-3_9.
- [110] M. Pal and G. M. Foody, "Feature selection for classification of hyperspectral data by SVM," *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, vol. 48, no. 5, pp. 2297–2307, May 2010, doi: 10.1109/TGRS.2009.2039484.
- [111] N. Bhatia and Vandana, "Survey of Nearest Neighbor Techniques," *IJCSIS) International Journal of Computer Science and Information Security*, vol. 8, no. 2, Jul. 2010, Accessed: Jun. 04, 2024. [Online]. Available: <https://arxiv.org/abs/1007.0085v1>
- [112] M. Muja and D. G. Lowe, "Scalable nearest neighbor algorithms for high dimensional data," *IEEE Trans Pattern Anal Mach Intell*, vol. 36, no. 11, pp. 2227–2240, Nov. 2014, doi: 10.1109/TPAMI.2014.2321376.
- [113] B. Krawczyk, L. L. Minku, J. Gama, J. Stefanowski, and M. Woźniak, "Ensemble learning for data stream analysis: A survey," *Information Fusion*, vol. 37, pp. 132–156, Sep. 2017, doi: 10.1016/J.INFFUS.2017.02.004.
- [114] O. Sagi and L. Rokach, "Ensemble learning: A survey," *Wiley Interdiscip Rev Data Min Knowl Discov*, vol. 8, no. 4, p. e1249, Jul. 2018, doi: 10.1002/WIDM.1249.
- [115] H. S. Stern, "Neural networks in applied statistics," *Technometrics*, vol. 38, no. 3, pp. 205–214, 1996, doi: 10.1080/00401706.1996.10484497.
- [116] D. Chicco, M. J. Warrens, and G. Jurman, "The coefficient of determination R-squared is more informative than SMAPE, MAE, MAPE, MSE and RMSE in regression analysis evaluation," *PeerJ Comput Sci*, vol. 7, pp. 1–24, Jul. 2021, doi: 10.7717/PEERJ-CS.623/SUPP-1.
- [117] 原田幸明, "希少資源・元素の現状," まてりあ, vol. 46, no. 8, pp. 543–548, 2007, doi: 10.2320/materia.46.543.
- [118] 内野裕雄, "希少元素の資源の現状," 日本金属学会会報, vol. 26, no. 8, pp. 778–782, 1987, doi: 10.2320/materia1962.26.778.
- [119] J. Lessard, J. de Bakker, and L. McHugh, "Development of ore sorting and its impact on mineral processing economics," *Miner Eng*, vol. 65, pp. 88–97, 2014, doi: <https://doi.org/10.1016/j.mineng.2014.05.019>.
- [120] T.-C. Pong, R. M. Haralick, J. R. Craig, R.-H. Yoon, and W.-Z. Choi, "The application of image analysis techniques to mineral processing," *Pattern Recognit Lett*, vol. 2, no. 2, pp. 117–123, 1983, doi: [https://doi.org/10.1016/0167-8655\(83\)90047-8](https://doi.org/10.1016/0167-8655(83)90047-8).
- [121] H. Wotrnb, "Sensor sorting technology-is the minerals industry missing a chance?," 2015.
- [122] F. Koerting *et al.*, "DRILL CORE MINERAL ANALYSIS BY MEANS OF THE HYPERSPECTRAL IMAGING SPECTROMETER HySpex, XRD AND ASD IN PROXIMITY OF THE MÝTINA MAAR, CZECH REPUBLIC," *The International Archives of the Photogrammetry, Remote Sensing and Spatial Information Sciences*, vol. XL-1/W5, pp. 417–424, 2015, doi: 10.5194/isprsarchives-XL-1-W5-417-2015.
- [123] W. Zhao and S. Du, "Spectral–Spatial Feature Extraction for Hyperspectral Image Classification: A Dimension Reduction and Deep Learning Approach," *IEEE Transactions on Geoscience and*

- Remote Sensing*, vol. 54, no. 8, pp. 4544–4554, 2016, doi: 10.1109/TGRS.2016.2543748.
- [124] Y. Chen, Z. Lin, X. Zhao, G. Wang, and Y. Gu, “Deep Learning-Based Classification of Hyperspectral Data,” *IEEE J Sel Top Appl Earth Obs Remote Sens*, vol. 7, no. 6, pp. 2094–2107, 2014, doi: 10.1109/JSTARS.2014.2329330.
 - [125] P. K. Goel, S. O. Prasher, R. M. Patel, J. A. Landry, R. B. Bonnell, and A. A. Viau, “Classification of hyperspectral data by decision trees and artificial neural networks to identify weed stress and nitrogen status of corn,” *Comput Electron Agric*, vol. 39, no. 2, pp. 67–93, 2003, doi: [https://doi.org/10.1016/S0168-1699\(03\)00020-6](https://doi.org/10.1016/S0168-1699(03)00020-6).
 - [126] J. Li, J. M. Bioucas-Dias, and A. Plaza, “Hyperspectral Image Segmentation Using a New Bayesian Approach With Active Learning,” *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, vol. 49, no. 10, pp. 3947–3960, 2011, doi: 10.1109/TGRS.2011.2128330.
 - [127] N. Mezned, S. Abdeljaoued, and M. R. Boussema, “ASTER Multispectral Imagery for Spectral Unmixing based Mine Tailing cartography in the North of Tunisia,” 2007. [Online]. Available: <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:14167518>
 - [128] S. Chabrilat, A. Goetz, H. Olsen, and L. Krosley, “Field and Imaging spectrometry For Identification and Mapping of Expansive Soils,” 2002, pp. 87–109. doi: 10.1007/978-0-306-47578-8_4.
 - [129] F. Melgani and L. Bruzzone, “Classification of hyperspectral remote sensing images with support vector machines,” *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, vol. 42, no. 8, pp. 1778–1790, 2004, doi: 10.1109/TGRS.2004.831865.
 - [130] J. Goldberger, G. E. Hinton, S. Roweis, and R. R. Salakhutdinov, “Neighbourhood Components Analysis,” in *Advances in Neural Information Processing Systems*, L. Saul, Y. Weiss, and L. Bottou, Eds., MIT Press, 2004. [Online]. Available: https://proceedings.neurips.cc/paper_files/paper/2004/file/42fe880812925e520249e808937738d2-Paper.pdf
 - [131] Mathworks, “activations.” Accessed: Dec. 10, 2024. [Online]. Available: <https://www.mathworks.com/help/deeplearning/ref/seriesnetwork.activations.html>
 - [132] “Neighborhood Component Analysis (NCA) Feature Selection.” Accessed: Dec. 10, 2024. [Online]. Available: <https://www.mathworks.com/help/stats/neighborhood-component-analysis.html>
 - [133] J. A. Acosta, A. Faz, S. Martínez-Martínez, R. Zornoza, D. M. Carmona, and S. Kabas, “Multivariate statistical and GIS-based approach to evaluate heavy metals behavior in mine sites for future reclamation,” *J Geochem Explor*, vol. 109, no. 1–3, pp. 8–17, Apr. 2011, doi: 10.1016/J.GEXPLO.2011.01.004.
 - [134] Z. Li, Z. Ma, T. J. van der Kuip, Z. Yuan, and L. Huang, “A review of soil heavy metal pollution from mines in China: Pollution and health risk assessment,” *Science of The Total Environment*, vol. 468–469, pp. 843–853, Jan. 2014, doi: 10.1016/J.SCITOTENV.2013.08.090.
 - [135] V. Balaram, “Rare earth elements: A review of applications, occurrence, exploration, analysis, recycling, and environmental impact,” *Geoscience Frontiers*, vol. 10, no. 4, pp. 1285–1303, Jul. 2019, doi: 10.1016/J.GSF.2018.12.005.

- [136] A. Akcil and S. Koldas, "Acid Mine Drainage (AMD): causes, treatment and case studies," *J Clean Prod*, vol. 14, no. 12–13, pp. 1139–1145, Jan. 2006, doi: 10.1016/J.JCLEPRO.2004.09.006.
- [137] R. A. Schowengerdt, "Remote Sensing," *Remote Sensing: Models and Methods for Image Processing*, pp. 1–515, Jan. 2006, doi: 10.1016/B978-0-12-369407-2.X5000-1.
- [138] F. A. Kruse, "Identification and mapping of minerals in drill core using hyperspectral image analysis of infrared reflectance spectra," *Int J Remote Sens*, vol. 17, no. 9, pp. 1623–1632, 1996, doi: 10.1080/01431169608948728.
- [139] S. Peyghambari and Y. Zhang, "Hyperspectral remote sensing in lithological mapping, mineral exploration, and environmental geology: an updated review," *J Appl Remote Sens*, vol. 15, no. 3, p. 031501, Jul. 2021, doi: 10.1117/1.JRS.15.031501.
- [140] P. Debba, F. J. A. Van Ruitenbeek, F. D. Van Der Meer, E. J. M. Carranza, and A. Stein, "Optimal field sampling for targeting minerals using hyperspectral data," *Remote Sens Environ*, vol. 99, no. 4, pp. 373–386, Dec. 2005, doi: 10.1016/J.RSE.2005.05.005.
- [141] F. D. van der Meer *et al.*, "Multi- and hyperspectral geologic remote sensing: A review," *International Journal of Applied Earth Observation and Geoinformation*, vol. 14, no. 1, pp. 112–128, 2012, doi: <https://doi.org/10.1016/j.jag.2011.08.002>.
- [142] J. Jia *et al.*, "Tradeoffs in the Spatial and Spectral Resolution of Airborne Hyperspectral Imaging Systems: A Crop Identification Case Study," *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, vol. 60, pp. 1–18, 2022, doi: 10.1109/TGRS.2021.3096999.
- [143] P. Raj and C. Surianarayanan, "Chapter Twelve - Digital twin: The industry use cases," in *Advances in Computers*, vol. 117, no. 1, P. Raj and P. Evangeline, Eds., Elsevier, 2020, pp. 285–320. doi: <https://doi.org/10.1016/bs.adcom.2019.09.006>.
- [144] N. Yokoya, "Resolution Enhancement of Hyperspectral Imagery," *Journal of The Remote Sensing Society of Japan*, vol. 38, no. 2, pp. 105–110, 2018, doi: 10.11440/rssj.38.105.
- [145] T. Akgun, Y. Altunbasak, and R. M. Mersereau, "Super-resolution reconstruction of hyperspectral images," *IEEE Transactions on Image Processing*, vol. 14, no. 11, pp. 1860–1875, Nov. 2005, doi: 10.1109/TIP.2005.854479.
- [146] P. V. Arun, K. M. Buddhiraju, A. Porwal, and J. Chanussot, "CNN-Based Super-Resolution of Hyperspectral Images," *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, vol. 58, no. 9, pp. 6106–6121, Sep. 2020, doi: 10.1109/TGRS.2020.2973370.
- [147] Y. Li, J. Hu, X. Zhao, W. Xie, and J. J. Li, "Hyperspectral image super-resolution using deep convolutional neural network," *Neurocomputing*, vol. 266, pp. 29–41, Nov. 2017, doi: 10.1016/J.NEUCOM.2017.05.024.
- [148] L. Zhang, J. Nie, W. Wei, Y. Li, and Y. Zhang, "Deep Blind Hyperspectral Image Super-Resolution," *IEEE Trans Neural Netw Learn Syst*, vol. 32, no. 6, pp. 2388–2400, Jun. 2021, doi: 10.1109/TNNLS.2020.3005234.
- [149] W. Dong, C. Zhou, F. Wu, J. Wu, G. Shi, and X. Li, "Model-Guided Deep Hyperspectral Image Super-Resolution," *IEEE Transactions on Image Processing*, vol. 30, pp. 5754–5768, 2021, doi: 10.1109/TIP.2021.3096999.

10.1109/TIP.2021.3078058.

- [150] X. Xu, Y. Zhong, L. Zhang, and H. Zhang, "Sub-pixel mapping based on a MAP model with multiple shifted hyperspectral imagery," *IEEE J Sel Top Appl Earth Obs Remote Sens*, vol. 6, no. 2, pp. 580–593, 2013, doi: 10.1109/JSTARS.2012.2227246.
- [151] P. V. Arun, K. M. Buddhiraju, and A. Porwal, "CNN based sub-pixel mapping for hyperspectral images," *Neurocomputing*, vol. 311, pp. 51–64, Oct. 2018, doi: 10.1016/J.NEUCOM.2018.05.051.
- [152] F. Fang, F. Li, C. Shen, and G. Zhang, "A variational approach for pan-sharpening," *IEEE Transactions on Image Processing*, vol. 22, no. 7, pp. 2822–2834, 2013, doi: 10.1109/TIP.2013.2258355.
- [153] N. Yokoya, C. Grohnfeldt, and J. Chanussot, "Hyperspectral and multispectral data fusion: A comparative review of the recent literature," *IEEE Geosci Remote Sens Mag*, vol. 5, no. 2, pp. 29–56, Jun. 2017, doi: 10.1109/MGRS.2016.2637824.
- [154] G. Vivone *et al.*, "A critical comparison among pansharpening algorithms," *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, vol. 53, no. 5, pp. 2565–2586, May 2015, doi: 10.1109/TGRS.2014.2361734.
- [155] L. Loncan *et al.*, "Hyperspectral Pansharpening: A Review," *IEEE Geosci Remote Sens Mag*, vol. 3, no. 3, pp. 27–46, Sep. 2015, doi: 10.1109/MGRS.2015.2440094.
- [156] M. Marconcini *et al.*, "Digital Twin Technology Challenges and Applications: A Comprehensive Review," *Remote. Sens.*, vol. 14, p. 1335, 2022, [Online]. Available: <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:266022735>
- [157] A. Rasheed, O. San, and T. Kvamsdal, "Digital Twin: Values, Challenges and Enablers From a Modeling Perspective," *IEEE Access*, vol. 8, pp. 21980–22012, 2019, [Online]. Available: <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:211060692>
- [158] K.-H. G. Bae *et al.*, "DIGITAL TWINS IN SIMULATIVE APPLICATIONS: A TAXONOMY," 2020. [Online]. Available: <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:230125766>

謝辞

本論文は筆者が北海道大学大学院工学院環境循環システム専攻博士後期課程及び秋田大学大学院国際資源学研究科国際資源学専攻前期課程に在籍中の研究成果をまとめたものである。北海道大学同専攻教授・秋田大学同専攻元教授川村洋平先生には指導教官として本研究の実施の機会を与えて頂き、その遂行にあたって終始ご指導を頂いた。ここに深謝の意を表する。北海道大学同専攻准教授大友陽子先生には同じく指導教官として、本論文の細部にわたりご指導を戴いた。ここに深謝の意を表する。また、チリ大学留学中の指導教官であるチリ大学大学院鉱山工学部門准教授 Luis Felipe Orellana 先生には、研究内容には直接関与はしていないが、留学期間中のご指導とサポートに深く感謝の意を表する。

本研究第 1 章では、北海道大学大学院工学院環境循環システム専攻客員教授富山眞吾先生参考文献を紹介して頂くとともに有益なご助言を頂いた。ここに同氏に対して感謝の意を表する。

本研究第 3 章及び第 5 章の実験では、秋田大学大学院国際資源学研究科教授柴山敦先生及び同専攻准教授芳賀一寿先生から実験試料を提供して頂くとともに有益なご助言を頂いた。ここに両氏に対して感謝の意を表する。

本研究第 4 章の実験では、北海道大学大学院工学院環境循環システム専攻教授伊藤真由美先生及び同専攻准教授 PARK Ilhwan 先生から実験試料を提供して頂くとともに有益なご助言を頂いた。ここに両氏に対して感謝の意を表する。また、当時北海道大学大学院工学院環境循環システム専攻博士後期課程相川公政氏（現在の所属：国立研究開発法人産業技術総合研究所エネルギー・環境領域環境創生研究部門研究員）から実験試料を提供して頂くとともに有益なご助言を頂いた。ここに同氏に対して感謝の意を表する。

本研究第 6 章の実験では、北海道大学大学院工学院環境循環システム専攻助教有馬孝彦先生からフィールドワークを含む様々な場面においてご指導を頂いた。ここに同氏に対して感謝の意を表する。また、北海道大学大学院工学院環境循環システム専攻教授大竹翼先生及び秋田大学大学院国際資源学研究科准教授鳥屋剛毅先生から有益なご助言を頂いた。ここに両氏に対して感謝の意を表する。加えて、JX 金属株式会社、横手市、独立行政法人エネルギー金属鉱物資源機構にはフィールドの提供や調査の支援を頂いた。感謝の意を表する。

北海道大学同専攻資源マネジメント研究室及び秋田大学同専攻資源経済・情報学研究室の各位には研究遂行にあたり日頃より有益なご討論ご助言を頂いた。ここに感謝の意を表する。

本研究の一部は、JSPS 科研費 JP23KJ0029、北海道大学次世代研究者挑戦的研究プログラム、深田野外調査助成、金属資源の生産技術に関する基礎研究によった。