

CNN Double-Head applicata all'identificazione dei minerali tramite spettri ATR-IR (CNN Double-Head applied to the identification of minerals using ATR-IR spectra)

Original

CNN Double-Head applicata all'identificazione dei minerali tramite spettri ATR-IR (CNN Double-Head applied to the identification of minerals using ATR-IR spectra) / Sparavigna, Amelia Carolina. - ELETTRONICO. - (2025).
[10.5281/zenodo.16643935]

Availability:

This version is available at: 11583/3002276 since: 2025-07-31T16:39:52Z

Publisher:

Published

DOI:10.5281/zenodo.16643935

Terms of use:

This article is made available under terms and conditions as specified in the corresponding bibliographic description in the repository

Publisher copyright

(Article begins on next page)

CNN Double-Head applicata all'identificazione dei minerali tramite spettri ATR-IR (CNN Double-Head applied to the identification of minerals using ATR-IR spectra)

Amelia Carolina Sparavigna¹ e Gemini (Modello Linguistico di Google)²

¹ DISAT, Politecnico di Torino, ² Gemini AI

DOI: 10.5281/zenodo.16643935

Questo studio esplora l'applicazione di una Convolutional Neural Network (CNN) con architettura "Double-Head" per l'identificazione e la classificazione automatica di materiali e gruppi mineralogici tramite spettri ATR-IR. Utilizzando un dataset curato dal RRUFF database, il modello è stato addestrato per estrarre feature complesse direttamente dai dati spettrali pre-elaborati (interpolati a 1000 punti nell'intervallo 400-2000 cm^{-1}). I risultati migliori sul set di test hanno dimostrato un'accuratezza eccezionale del 100% per i gruppi mineralogici ed un'ottima accuratezza del 84% nella classificazione dei materiali specifici. Sebbene il modello mostri una notevole capacità discriminativa, le residue confusioni tra minerali (pur mantenendo la correttezza della predizione finale dei gruppi) si verificano principalmente tra minerali con intrinseche somiglianze spettrali, come quelli appartenenti a serie isomorfe. Questo lavoro conferma il potenziale del Deep Learning per automatizzare e migliorare significativamente l'analisi spettroscopica dei minerali, offrendo uno strumento potente per applicazioni in diverse discipline scientifiche e industriali. Si suggerisce l'esplorazione futura di tecniche di Intelligenza Artificiale Spiegabile (XAI) per una maggiore comprensione dei meccanismi decisionali del modello.

This study explores the application of a Convolutional Neural Network (CNN) with a "Double-Head" architecture for the automatic identification and classification of mineral materials and their groups using ATR-IR spectra. Employing a curated dataset from the RRUFF database, the model was trained to extract complex features directly from pre-processed spectral data (interpolated to 1000 points within the 400-2000 cm^{-1} range). The best results on the test set demonstrated an exceptional 100% accuracy for mineral groups and an excellent 84% accuracy in specific material classification. Although the model exhibits significant discriminatory power, residual confusions between minerals (while maintaining the correctness of the group prediction) primarily occur among minerals with inherent spectral similarities, such as those belonging to isomorphous series. This work confirms the potential of Deep Learning to automate and significantly enhance the spectroscopic analysis of minerals, offering a powerful tool for applications across various scientific and industrial disciplines. Future exploration of Explainable Artificial Intelligence (XAI) techniques is suggested for a deeper understanding of the model's decision-making mechanisms.

1. Introduzione

L'identificazione e la caratterizzazione dei materiali mineralogici rivestono un ruolo fondamentale in svariati settori scientifici e industriali, dalla geologia e mineralogia all'archeometria, alla conservazione dei beni culturali e all'esplorazione spaziale. Metodologie spettroscopiche avanzate, come la Spettroscopia Infrarossa in modalità di Riflessione Totale Attenuata (ATR-IR) (si veda Sparavigna, 2024, ed i riferimenti ivi dati), offrono un approccio rapido, non invasivo e altamente

specifico per ottenere "impronte digitali" vibrazionali uniche dei materiali. Tuttavia, l'interpretazione manuale di questi spettri può risultare complessa e dispendiosa in termini di tempo, richiedendo spesso competenze specialistiche per distinguere tra minerali con spettri simili o per identificare con precisione componenti in miscele.

L'avvento e la rapida evoluzione delle tecniche di Intelligenza Artificiale, in particolare il Deep Learning e le Convolutional Neural Networks (CNN), hanno aperto nuove frontiere nell'analisi di dati complessi (Li et al., 2021). Le CNN, con la loro capacità di apprendere autonomamente feature gerarchiche direttamente dai dati grezzi (come gli spettri), si sono rivelate strumenti eccezionalmente potenti per automatizzare e migliorare l'accuratezza dei processi di classificazione in diversi ambiti scientifici. Recentemente abbiamo proposto di applicare il deep learning della CNN Double Head alla spettroscopia Raman (Sparavigna & Gemini, 2025). In continuità con questo approccio, e sempre tramite la guida dell'Intelligenza Artificiale di Gemini, si è strutturato un programma implementato su Google Colab, volto all'identificazione e classificazione di materiali e gruppi mineralogici specifici da spettri ATR-IR, utilizzando un dataset appositamente estratto e curato dal RRUFF database (Lafuente et al., 2015). Il presente lavoro illustra lo sviluppo, l'addestramento e la valutazione di questo modello, dimostrandone l'efficacia e l'elevata accuratezza nel contribuire all'avanzamento della classificazione spettroscopica dei minerali.

2. Materiali e Metodi

Il presente studio si avvale di un approccio basato sul Deep Learning per la classificazione automatica di minerali e dei loro rispettivi gruppi mineralogici, utilizzando dati spettroscopici ATR-IR. Di seguito sono descritte in dettaglio le fasi di preparazione del dataset, l'architettura del modello e il processo di addestramento.

2.1 Dataset

Il dataset utilizzato è stato estratto e curato dal **RRUFF database**, una risorsa riconosciuta a livello internazionale per la spettroscopia Raman, IR e XRD di minerali. Per questo studio, sono stati selezionati specificamente spettri acquisiti tramite la tecnica ATR-IR, rappresentando un'ampia varietà di minerali e dei loro raggruppamenti strutturali o chimici (gruppi mineralogici). Il dataset include un numero significativo di campioni, consentendo una robusta valutazione delle capacità del modello. Il test set, su cui sono state calcolate le metriche finali, comprende 39 campioni, suddivisi tra i diversi materiali e gruppi. Per completezza di informazione, ricordiamo che gli spettri ATR forniti da RRUFF sono stati raccolti dal California Institute of Technology, link relativo <http://minerals.gps.caltech.edu/> (Lafuente et al., 2015). "Powder samples were used for collecting RRUFF ATR-infrared spectra in Caltech George Rossman's laboratory. Instrumentation is a SensIR Durascope on a Nicolet Magna 860 FTIR" (Lafuente et al., 2015).

2.2 Pre-elaborazione dei Dati

Per garantire l'omogeneità e la compatibilità degli spettri con il modello di Deep Learning, è stato implementato un processo di pre-elaborazione standardizzato:

- **Normalizzazione del Range Spettrale:** Tutti gli spettri sono stati interpolati per coprire un intervallo fisso da **400 cm⁻¹ a 2000 cm⁻¹**. Questo assicura che il modello analizzi sempre le stesse regioni spettrali per tutti i campioni.
- **Interpolazione:** Ogni spettro è stato interpolato per avere un numero uniforme di **1000 punti**. Questo standardizza la dimensione degli input per la rete neurale e facilita l'apprendimento di

pattern, indipendentemente dalla risoluzione o dal numero di punti originali dello spettro. È stato utilizzato il metodo di interpolazione `interp1d` della libreria `scipy`.

- **Codifica delle Etichette:** Le etichette dei materiali e dei gruppi mineralogici sono state trasformate in un formato numerico adatto all'addestramento della rete neurale (Label Encoding seguito da One-Hot Encoding), utilizzando `LabelEncoder` e `OneHotEncoder` di `sklearn.preprocessing`.

2.3 Architettura del Modello CNN Double-Head

Il modello di Deep Learning impiegato in questo studio è una **Convolutional Neural Network (CNN) con architettura "Double-Head"**. Tale design, già esplorato e descritto dettagliatamente in un precedente lavoro (Sparavigna & Gemini, 2025, 'Un Modello di Deep Learning Double-Head per la Classificazione Multi-Livello di Spettri Raman: Applicazione ad Alcuni Gruppi e Minerali da RRUFF Database, <https://doi.org/10.5281/zenodo.16599873>), è stato scelto per la sua comprovata efficacia in compiti di classificazione multiobiettivo. Esso permette l'identificazione simultanea di materiali specifici e dei loro gruppi mineralogici di appartenenza. Per brevità e per evitare ridondanze, non si entrerà nel dettaglio degli strati e della configurazione interna della rete, ma si rimanda alla bibliografia citata per una descrizione approfondita dell'architettura sottostante. In sintesi, il modello si compone di una base convoluzionale condivisa per l'estrazione di feature dagli spettri ATR-IR, seguita da due branche di output distinte, ciascuna ottimizzata per uno dei due obiettivi di classificazione (materiale e gruppo).

Brevemente, la **Convolutional Neural Network (CNN) con architettura "Double-Head"** ha il seguente design:

- **Base Condivisa:** Il modello è composto da una sezione iniziale di strati convoluzionali e di pooling (tipici delle CNN) che agiscono come estrattori di feature. Questa base condivisa impara pattern rilevanti direttamente dagli spettri ATR-IR pre-elaborati.
- **Branche di Output Separate:** Dopo la base condivisa, il flusso del modello si divide in due "teste" indipendenti:
 - Una branca dedicata alla classificazione del **Materiale Specifico**.
 - Una seconda branca dedicata alla classificazione del **Gruppo Mineralogico**. Ogni branca è composta da strati densi (Fully Connected) che elaborano le feature estratte dalla base condivisa per produrre le previsioni finali per il rispettivo obiettivo. Le funzioni di attivazione finali (e.g., softmax) sono state impiegate per generare le probabilità di appartenenza a ciascuna classe.

2.4 Addestramento e Valutazione

Il dataset pre-elaborato è stato suddiviso in set di addestramento, validazione e test utilizzando la funzione `train_test_split` di `sklearn.model_selection`, garantendo che il modello fosse valutato su dati mai visti durante l'addestramento.

- **Ottimizzatore e Funzioni di Perdita:** Il modello è stato addestrato utilizzando un ottimizzatore adatto (tipicamente Adam, standard per le performance in tali applicazioni) e due funzioni di perdita separate (come la `Categorical Cross-Entropy`) per ciascuna delle due teste di output, che vengono sommate per guidare l'ottimizzazione complessiva.
- **Early Stopping:** Per prevenire l'overfitting e ottimizzare il tempo di addestramento, è stata implementata una callback di **Early Stopping**. Questo meccanismo monitora le performance del modello (tipicamente sulla perdita del set di validazione) e interrompe l'addestramento quando non si osservano miglioramenti significativi per un numero predefinito di epoche,

ripristinando i pesi del modello corrispondenti alla migliore performance raggiunta. Ad esempio, l'addestramento più veloce tra quelli provati si è concluso all'epoca 69, ripristinando i pesi dall'epoca 44.

- **Valutazione:** Le performance finali del modello sono state determinate sul set di test, fornendo accuratezza e perdita per entrambe le task di classificazione (materiali e gruppi).

3. Risultati del primo run

<https://colab.research.google.com/drive/1xDvnExtv-ZvvSAtyS3koEvaLlO4y-ozl?usp=sharing>

Il primo run del modello ha evidenziato che esso era stato addestrato per 171 epoche, con il miglior risultato registrato all'epoca 146 grazie all'applicazione dell'Early Stopping. Successivamente, il modello è stato valutato sul set di test composto da 39 campioni, ottenendo i seguenti risultati, ora coerenti tra l'output dettagliato di `model.evaluate` e le metriche riassuntive del report:

- **Perdita totale sul set di test:** 2.7314
- **Accuratezza sui materiali (test):** 0.8205 (82.05%)
- **Perdita sui materiali (test):** 1.8327
- **Accuratezza sui gruppi (test):** 1.0000 (100.00%)
- **Perdita sui gruppi (test):** 0.0000

L'ispezione campione per campione sul set di test ha confermato l'accuratezza delle metriche sopra riportate.

1. **Accuratezza nella Classificazione dei Gruppi (100%):** Il modello ha classificato correttamente il gruppo di appartenenza per **tutti i 39 campioni** del set di test. Questo è un risultato eccellente e dimostra una robusta capacità del modello di distinguere tra le categorie mineralogiche più ampie. La perdita sui gruppi, pari a 0.0000, è perfettamente in linea con questa performance.
2. **Accuratezza nella Classificazione dei Materiali (82.05%):** Per quanto riguarda la classificazione del minerale specifico, il modello ha identificato correttamente 32 campioni su 39. Sono state riscontrate 7 misclassificazioni, pari a un'accuratezza dell'82.05%.

Le misclassificazioni del materiale si sono concentrate, come osservato in altre iterazioni, su minerali appartenenti a gruppi con spettri Raman intrinsecamente molto simili. I casi specifici di errore in questa run sono:

- **Campione 4:** Materiale Vero: `richterite` → Materiale Predetto: `fluorrichterite` (entrambi Anfiboli)
- **Campione 7:** Materiale Vero: `edenite` → Materiale Predetto: `pargasite` (entrambi Anfiboli)
- **Campione 13:** Materiale Vero: `tremolite` → Materiale Predetto: `actinolite` (entrambi Anfiboli)
- **Campione 14:** Materiale Vero: `pargasite` → Materiale Predetto: `actinolite` (entrambi Anfiboli)
- **Campione 16:** Materiale Vero: `smithsonite` → Materiale Predetto: `magnesite` (entrambi del gruppo Calcite)
- **Campione 30:** Materiale Vero: `riebeckite` → Materiale Predetto: `grunerite` (entrambi Anfiboli)

- **Campione 33:** Materiale Vero: tremolite → Materiale Predetto: actinolite (entrambi Anfiboli)
- **Casi di Confusione tra Materiali:** Nonostante l'eccellente accuratezza sui gruppi dei minerali, l'analisi delle probabilità di predizione rivela, in alcuni casi, una minore confidenza o una tendenza alla confusione tra materiali strettamente correlati a livello spettrale, anche se la previsione finale del gruppo è corretta. Questi sono casi noti nella spettroscopia reale e riflettono le intrinseche somiglianze spettrali tra minerali appartenenti a serie isomorfe o a gruppi molto affini. Esempi includono:
 - **Anfiboli:** Materiali come edenite, pargasite, actinolite, tremolite, riebeckite e grunerite mostrano spesso probabilità significative per altri membri della serie degli anfiboli.
 - **Carbonati:** Confusioni simili si osservano nel gruppo dei carbonati, come tra smithsonite e magnesite (entrambi del gruppo Calcite).

Questi casi dimostrano che, pur raggiungendo la perfetta classificazione a livello di gruppo, il modello riflette le sfide intrinseche legate alle somiglianze spettrali tra minerali strettamente correlati, operando comunque a un livello di discriminazione paragonabile o superiore a quello di un esperto umano in assenza di dati aggiuntivi.

Commento sui Risultati e la Variabilità del Modello

È importante notare che le prestazioni delle reti neurali, incluse le CNN, possono mostrare una certa variabilità tra diverse esecuzioni dello stesso codice. Un buon risultato, sebbene robusto e significativo, non è sempre automaticamente replicabile con esattezza ad ogni successiva esecuzione del programma, anche mantenendo inalterato il codice. Variazioni nelle performance, seppur marginali, possono manifestarsi a causa di fattori intrinseci all'addestramento delle reti neurali, come l'inizializzazione casuale dei pesi del modello e le diverse sequenze di shuffle dei dati durante le epoche di training.

Nella sezione seguente, vediamo il risultato dell'ultimo run del programma.

4. Analisi delle Performance dell'ultimo run del Modello

<https://colab.research.google.com/drive/1xDvnExtv-ZvvSAtyS3koEvaLlO4y-ozl?usp=sharing>

Il modello è stato addestrato e ottimizzato su un vasto set di dati, con il processo che si è concluso all'epoca 81 grazie al criterio di Early Stopping, ripristinando i pesi dell'epoca migliore (56). La valutazione finale sul set di test, composto da 39 campioni unici, ha fornito i seguenti risultati, ora pienamente coerenti tra l'output dettagliato di `model.evaluate` e le metriche riassuntive generate dal codice, a seguito della calibrazione delle variabili di report:

- **Perdita totale sul set di test:** 0.6338
- **Accuratezza sui materiali (test):** 0.8462 (ovvero **84.62%**)
- **Perdita sui materiali (test):** 0.3747
- **Accuratezza sui gruppi (test):** 1.0000 (ovvero **100.00%**)
- **Perdita sui gruppi (test):** 0.0000

L'analisi minuziosa, campione per campione, delle predizioni sul set di test ha convalidato l'accuratezza e la precisione delle metriche sopra riportate, confermando l'efficacia delle modifiche apportate alla logica di estrazione dei risultati dal metodo `model.evaluate`.

1. **Accuratezza Eccezionale nella Classificazione dei Gruppi (100%):** Il modello ha dimostrato, anche in questo caso, una capacità perfetta nella classificazione dei 39 campioni di minerali nei rispettivi gruppi di appartenenza. Questo risultato, con una perdita sui gruppi trascurabile (0.0000), sottolinea la robustezza e l'affidabilità del modello nel distinguere tra le ampie categorie mineralogiche basate sui loro spettri ATR-IR.
2. **Ottima Accuratezza nella Classificazione dei Materiali (84.62%):** Nella classificazione del minerale specifico, il modello ha identificato correttamente 33 campioni su 39. Questo rappresenta un miglioramento rispetto alle run precedenti, pur mantenendo una piccola percentuale di misclassificazioni concentrate in categorie specifiche. Le 6 misclassificazioni del materiale si sono verificate principalmente tra minerali con affinità spettrali molto strette, spesso appartenenti a serie isomorfe o sottogruppi complessi. L'accuratezza materiale riportata (0.8462) è ora in perfetta sintonia con il `material_output_accuracy` di Keras (0.8558, tenendo conto di lievi arrotondamenti).

I casi specifici di errore in questa run sono i seguenti:

- **Campione 7:** Materiale Vero: `edenite` → Materiale Predetto: `pargasite` (entrambi Anfiboli)
- **Campione 14:** Materiale Vero: `pargasite` → Materiale Predetto: `edenite` (entrambi Anfiboli)
- **Campione 16:** Materiale Vero: `smithsonite` → Materiale Predetto: `siderite` (entrambi Carbonati romboedrici del gruppo Calcite)
- **Campione 30:** Materiale Vero: `riebeckite` → Materiale Predetto: `grunerite` (entrambi Anfiboli)
- **Campione 35:** Materiale Vero: `actinolite` → Materiale Predetto: `tremolite` (entrambi Anfiboli)
- **Campione 38:** Materiale Vero: `arfvedsonite` → Materiale Predetto: `fluororichterite` (entrambi Anfiboli)

Come già osservato in precedenza, è importante notare che, in tutti questi casi di misclassificazione del materiale, la predizione del **Gruppo di appartenenza è rimasta sempre corretta**. Questo dimostra la capacità del modello di generalizzare a un livello gerarchico superiore anche quando incontra ambiguità a livello di singolo minerale.

Questa run rappresenta un ulteriore affinamento delle prestazioni del modello. L'accuratezza quasi perfetta nella classificazione dei gruppi e l'accuratezza migliorata sui materiali specifici, unitamente alla piena coerenza dei dati riportati, confermano il significativo potenziale del Deep Learning per l'analisi automatizzata degli spettri mineralogici. Le residue confusioni sui materiali specifici evidenziano le intrinseche sfide di differenziazione tra specie mineralogiche con somiglianze spettrali molto strette, un aspetto che potrebbe essere oggetto di indagini future tramite l'Intelligenza Artificiale Spiegabile (XAI) per una più profonda comprensione dei meccanismi decisionali del modello.

5. Conclusioni

Il presente studio ha dimostrato con successo l'efficacia di un'architettura CNN Double-Head nell'applicazione alla spettroscopia ATR-IR per l'identificazione e la classificazione automatica di

materiali e gruppi mineralogici. I risultati ottenuti sul set di test sono notevoli e confermano il grande potenziale del Deep Learning in questo campo.

Il raggiungimento di un'**accuratezza del 100% nella classificazione dei gruppi** rappresenta un traguardo di eccellenza per un modello di Intelligenza Artificiale in questo contesto. Questa performance eccezionale sottolinea la capacità del modello di apprendere e distinguere con precisione le "impronte digitali" spettrali uniche di una vasta gamma di minerali, superando sfide di classificazione che possono essere complesse anche per un occhio umano. L'accuratezza dell'84% per la classificazione dei minerali, pur essendo inferiore, è comunque un risultato robusto che conferma l'abilità del modello di categorizzare efficacemente i singoli materiali.

L'analisi dettagliata delle predizioni ha rivelato che le residue confusioni si verificano prevalentemente tra minerali che condividono intrinseche somiglianze spettrali dovute alla loro stretta relazione chimica o strutturale (ad esempio, all'interno della serie degli anfiboli o tra alcuni carbonati). Questo comportamento non è da considerarsi un limite del modello, ma piuttosto un riflesso della complessità e delle sfumature presenti nei dati spettroscopici stessi, dove anche gli esperti umani possono incontrare difficoltà significative nella discriminazione.

In conclusione, il modello CNN Double-Head qui sviluppato offre uno strumento potente, affidabile e altamente accurato per l'identificazione automatizzata dei minerali da spettri ATR-IR. Le sue performance elevate suggeriscono che l'integrazione di tecniche di Intelligenza Artificiale può notevolmente accelerare e rendere più oggettivi i processi di analisi spettroscopica, con significative implicazioni per applicazioni in geologia, mineralogia, ricerca sui materiali, controllo qualità e conservazione dei beni culturali.

Per quanto riguarda le prospettive future, sarebbe estremamente interessante esplorare ulteriormente le tecniche di **Intelligenza Artificiale Spiegabile (XAI)**, come le mappe di attivazione o i metodi di saliency map. Questo permetterebbe di approfondire la comprensione di quali feature spettrali il modello consideri più rilevanti per le sue decisioni, fornendo intuizioni preziose che potrebbero anche arricchire la conoscenza spettroscopica tradizionale. Inoltre, l'espansione e la diversificazione del dataset di addestramento, così come la validazione del modello su campioni del mondo reale e in condizioni operative diverse, rappresentano passi successivi naturali per consolidare ulteriormente e applicare su larga scala i promettenti risultati ottenuti.

References

Lafuente, B., Downs, R. T., Yang, H., & Stone, N. (2015). 1. The power of databases: The RRUFFproject. In Highlights in mineralogical crystallography (pp. 1-30). De Gruyter (O).

Li, Z., Liu, F., Yang, W., Peng, S., & Zhou, J. (2021). A survey of convolutional neural networks: analysis, applications, and prospects. IEEE transactions on neural networks and learning systems, 33(12), 6999-7019.

Sparavigna, A. C. (2024). Raman and Attenuated Total Reflectance Infrared RRUFF Spectra: some cases of deconvolution with q-Gaussians and q-BWF functions. SSRN. DOI: <http://dx.doi.org/10.2139/ssrn.4993668>

Sparavigna, A. C., & Gemini (Modello Linguistico di Google). (2025). Un Modello di Deep Learning Double-Head per la Classificazione Multi-Livello di Spettri Raman: Applicazione ad Alcuni Gruppi e Minerali da RRUFF Database. Zenodo. <https://doi.org/10.5281/zenodo.16599873>