

GANとパーシステントホモロジーのシナジーによる統計的微細組織解析

Statistic Microstructure Analysis by Synergy of GAN and Persistent Homology

株式会社村田製作所¹ ○本多 淳史¹, 池嶋 康二¹

Murata Manufacturing, Co., Ltd.¹ ○Atsushi Honda¹, Koji Ikeshima¹

E-mail: hnd@murata.com

材料微細組織像には材料特性とのかかわりが深い何らかの要素が含まれることが期待される。そのため材料開発では多様な機器を用いて頻繁に材料微細組織像が撮像される。取得した像の定量解析における恣意性低減と解釈性向上のために、われわれはパーシステントホモロジー [1] (Persistent Homology : PH) と呼ばれる数理に基づく解析手法を積極的に活用している。PH 解析を用いた材料微細組織像の特徴量化は、測長などの主観要素を含まないため機械学習との親和性が高い。しかし材料開発では一つの試料につき一枚程度の像しか取得されないため、機械学習に供するデータ数が過少であるという問題がある。

材料微細組織の撮像とは、対象材料を確率モデルと捉えた場合におけるサンプリング行為に他ならない。実際に取得された材料微細組織像から確率モデルを推定することは GAN (Generative Adversarial Network : 敵対的生成ネットワーク) の生成器を構築することと類似している。そのため GAN を活用して材料微細組織像を大量に生成することでデータ数の問題を解決できる。しかし GAN により生成される材料微細組織像の質は敵対的学習の良否に大きく依存するため、教師データの特徴を生成器が常に保有することは保証されない。われわれは、学習安定性に優れる Conditional GAN を自作するとともに、GAN による生成画像群と教師画像との特徴の類似性を PH 解析を用いて定量評価することで生成画像の質を担保する技術を開発した。具体的には、GAN の各学習ステップにおける生成器を用いて材料微細組織像を数百枚規模で生成し、これらを PH 解析して得られる特徴量を主成分分析により次元削減する。次に、同じ条件で教師画像の PH 特徴量の主成分値を取得する。その後、主成分値空間における生成画像分布中心と教師画像位置との距離を算出することで、生成画像と教師画像との間の特徴の類似性を定量的に評価するものである。これにより審美的な主観に依存せずに生成器の質を担保することができる。

この技術を活用することで得られたアドバン스는以下の二点である。第一に、材料微細組織像の類似度の統計的評価である。少量枚数の材料微細組織像を PH 解析を用いて比較すれば、当該画像同士の違いが定量化されるのみであり、本質的な特徴の違いを議論することは難しい。開発技術を活用することで、教師画像の特徴を有することが担保された大量の材料微細組織像を生成できるため、画像間の本質的な特徴の類似度を KLD (Kullback Leibler Divergence) などを用いて定量的に評価することができるようになる。第二に、未実験条件における材料微細組織像と材料特性の同時推定である。材料合成条件を Conditional GAN のパラメータとしつつ、PH 解析を援用した高品質な生成モデル構築を行うことで、未実験条件における材料微細組織像を内挿的に推定して生成することができる。大量に生成した材料微細組織像に対する PH 解析により得られた特徴量を用いて、材料特性を目的変数とした教師あり学習を行うことで、未実験条件の材料微細組織の推定像に対応する材料特性を知ることができる。また GAN による生成画像の特徴は分布を持つため生成の不確かさが材料特性の不確かさに反映される。これにより推定結果の採否に関わる意思決定を客観的に行うことができる。以上のように本技術を活用することで、個別少量の材料微細組織像を直接評価するだけでは不可能な統計的な視点での材料微細組織像解析を、大量の材料微細組織像を取得せずに行うことができるようになった。

[1] H. Edelsbrunner et al., *Discret. Comput. Geom.* **28**, 511 (2002).