

機械学習による CNT フォレスト断面 SEM 画像の特徴量抽出と分類

1230083 神生 龍一（先進エネルギーナノ材料研究室）

（指導教員 古田 寛 教授）

1. 研究背景

カーボンナノチューブ(Carbon Nanotube: CNT)は構造の違いによってさまざまな優れた物性を示すことが知られており、応用のための研究が行われている。CNT フォレストの構造と物性の関係として、配向性や本数密度、直径といった断面構造と光学的特性に相関があることが報告されている[1]。この断面構造を評価する従来手法として Filling factor やフーリエ変換などの画像処理技術が用いられてきた。これらの手法は事前に最適なパラメータを指定する必要があるが、パラメータの指定は評価者の主観に依存するため、再現性に課題があり、評価者に依存せず再現性の高い構造評価手法が求められる。従来手法による課題は再現性に限らず、評価者の人力で行われることが多く効率化、省力化という課題も存在する。

2. 研究目的

CNT 構造と物性の未知の関連性を見出すという材料科学的興味と、CNT 構造評価の再現性向上と効率化という産業応用の課題に対し、本研究では CNT フォレスト画像情報を対象とし、その断面構造の類似した画像を自動でグループ分けすることを研究目的に設定した。目的を達成するため、機械学習により CNT フォレストの断面構造の特徴量の抽出、これによる画像のクラスタリングを行い、モデルの性能検証を行った。

3. 実験方法

エンコーダとデコーダの二つのニューラルネットワークで構成されるオートエンコーダに、報告[1]に掲載されている CNT フォレスト断面 SEM 画像を 64 ピクセル×64 ピクセルの大きさに切り出して学習させた。CNT フォレスト断面 SEM 画像をオートエンコーダに入力した際のエンコーダの出力を CNT フォレストの断面構造の特徴を持った特徴量だと仮定して抽出した。抽出した特徴量に対して主成分分析を用いて特徴量の次元圧縮を行うことで主成分を求めた。そして混合ガウスモデルを用いて主成分のクラスタリングを行い、各クラスタに対応する画像を確認、評価した。

4. 実験結果

学習させたオートエンコーダから抽出した特徴量と主成分分析を用いて次元圧縮をして得られた主成分の分布を図 1 に示す。主成分分析を行う前では原点を中心に集まった分布に対し、主成分分析を行った後では原点中心に集まっている部分と右下と右上の二か所にこぶ状に突出するデータの集まりが認められた。

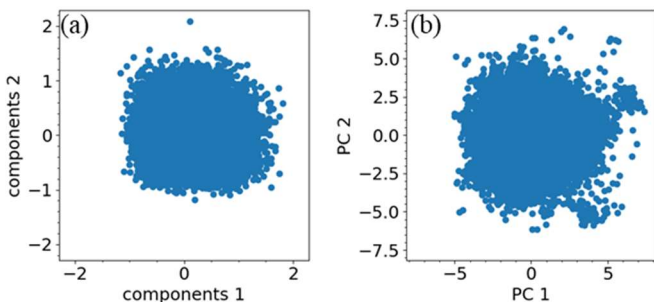


図 1 (a)抽出した特徴量の分布と(b)主成分の分布

主成分の混合ガウスモデルによるクラスタリング結果を図 2 に示す。原点を中心として大きなクラスタ 4、クラスタ 5、クラスタ 7 が広がっており、その上にまばらにクラスタ 1 とクラスタ 8 が広がった。クラスタ 0、クラスタ 3、クラスタ 9 は原点付近ではなく、クラスタ 7 の縁に偏っており、クラス

タ 6 は図 1(b)の二つのこぶのようになっている箇所に分布していた。

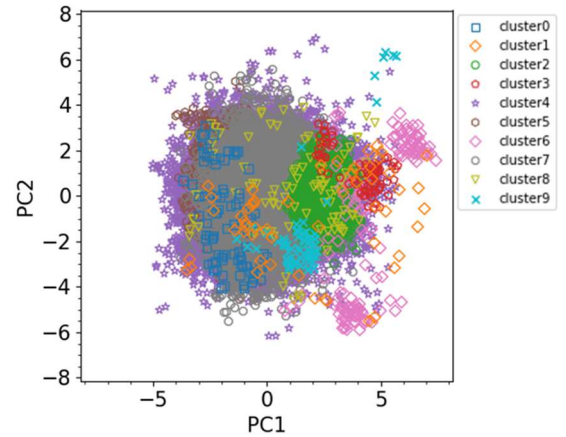


図 2 各クラスタの主成分上の分布

各クラスタに対応する画像を図 3 に示す。図 2 で全体的に広く分布したクラスタは、図 3 で垂直配向している CNT フォレストの断面画像に対応していた。それに対し、偏って分布したクラスタは、SEM 画像内の一部の CNT が束になることでその部分の輝度が高くなった箇所（クラスタ 6）に対応しており、CNT を 1 本ずつ数えることが困難な CNT 束を自動で検出できたことを表している。

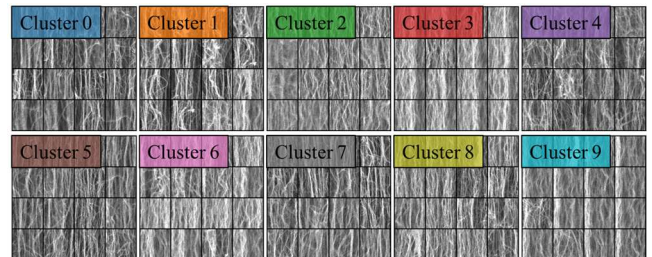


図 3 各クラスタに対応する CNT フォレスト断面 SEM 画像

5. まとめ

オートエンコーダによる特徴量抽出と主成分分析による次元圧縮そして混合ガウスモデルによるクラスタリングを行うことによって、CNT フォレストの断面 SEM 画像について、類似性の高い構造を持つ画像のグループ分けを自動で行うことに成功した。また、各クラスタの主成分上の分布において、一部に偏って分布したクラスタに対応する画像は、CNT が束状に集合し、一本ずつ数えることが困難な画像の個所を明確に対応しており、配向性や本数密度などを解析することが難しい画像の異常検知に成功したといえる。

参考文献

[1] A. Pander, K. Ishimoto, A. Hatta, H. Furuta, Vacuum, 154 (2018) 285-295,