

機械学習によるCNTフォレスト断面画像の解析と 光反射率に影響を及ぼす構造の推定

Machine Learning-Based Cross-Sectional Structural Analysis of CNT Forests and Prediction of Structural Factors Affecting Optical Reflectance

1275051 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. 背景・目的

カーボンナノチューブ (CNT) はグラフェンシートを円筒状に丸めたシンプルな構造をした物質であるが、有用な物性を多く持っており、CNTは光学分野では太陽熱の集熱材やメタマテリアルの材料として期待されている。反射・吸収が構造に依存しているためであり、CNTフォレストと呼ばれる基板上に垂直高密度に分布したものは配向性や密度といった構造がかかわっていることが報告されている [1]。そのため、構造の解析は応用において重要であるが、従来の解析方法では直接構造と光学特性の相関を解析することはできなかった。

近年では材料開発において機械学習を用いて効率的に進めるマテリアルズ・インフォマティクスと呼ばれる取り組みがあり、その一つに複数のCNT分散液の画像から電気特性を予測するという報告がある [2]。

そこで、本研究では、この課題に対して、機械学習を用いたCNTフォレストの断面構造画像から反射率を予測し、得られた予測結果された画像と実際のスペクトルを評価し、反射率に影響を及ぼす構造を明らかにすることを目的とした。

2. 方法

機械学習モデルの準備のためにまずデータセットを次のようにして作成した。異なる条件で合成された9サンプルのCNTフォレストの断面構造を走査型電子顕微鏡で撮影した画像に対して64×64 px (約600×600 nm²)のサイズをおよび32×32 px (約300×300 nm²)の2種類のサイズの画像を16 px間隔で取得した。次にそれぞれのサンプルの全反射スペクトルに対して波長700 nmにおける反射率に基づいて1%以上のサンプルの画像に「High」のラベルを、0.2%以下のものに「Low」のラベルを、それ以外のものにはラベルを付けなかった。

分類を行うモデルには画像の特徴抽出を行う部分にResNet [3]を、抽出された特徴から分類を行う部分に多層パーセプトロンを使用した。

そして、このモデルに対して画像を入力し「High」と「Low」のラベルの二値分類をするように訓練を行った。また、ラベルの付いていない画像に対しては訓練では使用しなかった。なぜなら、あいまいな反射率を持つ画像がどのような分類結果を示すかに興味があったため。

訓練が完了のち、ラベルの有無によらず画像をモデルに入力し、モデルが分類した画像がどのような構造を持っているかを評価した。

3. 結果・考察

各画像サイズの場合で、「High」と「Low」それぞれに分類された画像の枚数を表1に示す。64×64 pxではラベルを付けられた画像において同じラベルに分類されていたのに対して、32×32 pxでは多くの画像でつけたラベルと同じラベルに分類されていたが、一部の画像が逆のラベルに分類されていた。逆のラベルに分類されていた構造を見ると配向性が悪い構造や、密度の低い構造の画像が対応しており、従来知られてきたCNTフォレストの構造と物性と同じ傾向をモデルが認識しているのではないかと考えた。

また、ラベルを付けていないサンプルの画像については、両方のサイズで画像がどちらに多く分類されているか、という傾向は0番と1番は同じだったものの、2番のサンプルで

は64×64 pxの場合は「Low」に、32×32 pxの場合では拮抗しながらも「High」に多く分類されていた。このことについて、各画像を見ると2番のサンプルの構造は比較的配向性がよいものの疎密があるような構造になっており、64×64 pxでは一枚の中に疎密があり、32×32 pxでは画像それぞれが疎密の構造に分かれていたことから、前者では配向性のみから判断したため「Low」に、後者では疎密から判断し「High」に判断されたと考えた。

また、これに関して、2番サンプルのスペクトルにも特徴があり、420 nmから反射率が上昇しており、これは、CNTフォレストへの入射光し、CNTとの相互作用で反射した光が、疎な部分を通して漏れ出たためだと考えた。

表1 各サンプルにおける画像サイズごとに分類された画像の枚数

ラベル	サンプル 番号	64×64px		32×32px	
		High	Low	High	Low
High	4	300	0	1182	18
	6	300	0	1151	49
	8	300	0	1164	36
Low	3	0	300	39	1161
	5	0	300	8	1192
	7	0	300	63	1137
無し	0	224	76	1085	115
	1	4	296	136	1064
	2	81	219	732	468

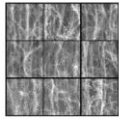
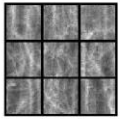
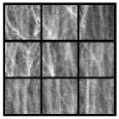
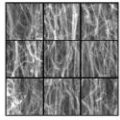
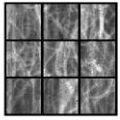
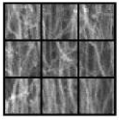
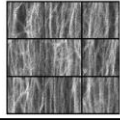
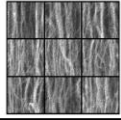
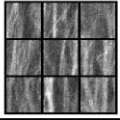
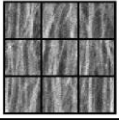
Label (No.)	64×64 px		32×32 px	
	High	Low	High	Low
High (No.4)				
Low (No.3)				
None (No.2)				

図1 各画像サイズにおける、元のラベルと高低のラベルに分類された構造画像。ラベルの下に書いてある数字は画像のサンプル番号。

参考文献

- [1] A. Pander, *et al*, *Vacuum*, **154** (2018) 285-295.
- [2] T. Honda, *et al*, *Springer Nature*, **2** (2021) 88.
- [3] K. He, *et al*, *IEEE-CS*, **2016-December** (2015) 770-778.