

トポロジカルデータ解析を用いた材料顕微画像の定量化

Quantification of Microscopic Images of Materials based on Topological Data Analysis

東北大 WPI-AIMR, 物材機構 °赤木 和人

Tohoku Univ., NIMS, °Kazuto Akagi

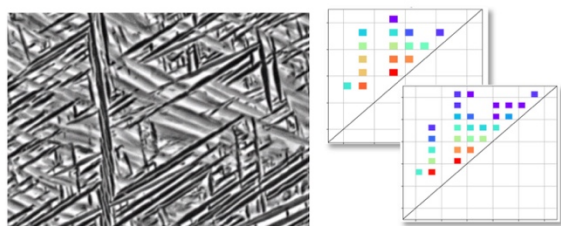
E-mail: akagi@wpi-aimr.tohoku.ac.jp

データ科学的な材料設計を目指すにあたってミクロな構造とプロセス条件や物性値との相関を調べることは不可欠であるが、複雑な顕微画像を定量的なデータとして収録し、あるいは逆解析可能な形で機械学習にかけるには相応の工夫が必要となる。本講演では、パーシステント・ホモロジーという新しい数学的枠組みをベースとし、幾何学的特徴に基づいて複雑なデータの「かたち」を記述する試みを紹介する。

パーシステント・ホモロジーは離散点の集まりを入力データとし、系に含まれる n 次元の「穴」の形や大きさの情報を調べることができる。フィルトレーションと呼ばれる操作に伴う各「穴」の生成と消滅を記録して得られる 2 次元ヒストグラムをパーシステント図と呼び、複雑なデータに潜む秩序やパターンを可視化しつつ、ユニークかつコンパクトに縮約された情報を与える。このパーシステント図を「適切に」ベクトルに変換して種々の機械学習の手法と組み合わせることで、自明／非自明な特徴量の抽出が可能となる。デジタル化された顕微画像もピクセルを構成要素とする離散点データであり、この枠組みを適用できる。

例として金属の組織構造の 2 次元画像や多孔質材料の 3 次元画像を解析したところ、白黒二値化できる場合は、画像のピクセル数によらずたかだか 100 次元程度のベクトル 2 本 (2 次元の場合)、もしくは 3 本 (3 次元の場合) を用いて定量化できること、それが機械学習を用いたサンプルの分類に有用な情報を持っていることが分かった。8bit グレースケール画像として扱う場合は 6 万 5 千次元程度のベクトル長となるが、それでも大幅なデータの縮約と再利用性・検索性の向上が期待できる。我々の枠組みの強みは、元の画像のどこに特徴が乗っているのかを逆方向の解析で調べることができる点にある。これを活用して、材料特性に少なからぬ影響を与える構造の不均一性の定量化についても議論する。

複雑な組織構造をコンパクトな「パーシステント図」に変換



穴の連結構造に基づく 3 次元画像の分類

