

名古座大字 大学院工学研究科 材料デザイン工学専攻 教授

名古屋大学

足立吉隆 Yoshitaka Adachi

Zhi-Lei Wang

名古屋大学 大学院工学研究科 材料デザイン工学専攻 講師

小川登志男 Toshio Ogawa

大学院工学研究科 材料デザイン工学専攻 研究員

し 緒言

材料組織画像の特徴量を評価するに際しては、大きく分け て二つのアプローチがある。一つは前報¹¹で述べた人類が理 解できる特徴量を抽出する方法であり、ここでは計量形態学 に基づいて、二次元(結晶粒径、面積率などmetric特徴量) あるいは三次元の特徴量(連結性、分岐、曲率などの位相・ 微分幾何学的特徴量)が求められる。もう一つは画像の輝度 値のパターンを数学的に解析する手法である。後者の特徴量 は必ずしも人類が理解できるとは限らないが、組織形態の複 雑性をより一層評価できる可能性がある。この手法は各座標 における点の分散を数学的に解析する手法である。材料工学 的に重要な特徴量であれ、数学的に重要な特徴量であれ、そ れらを使って画像の類似性を定量評価することが特性の理解 に役立つこともあると推察される。

そこで、本稿では粒子分散状態の数学的な解析ならびに2 つの画像の類似性評価に焦点を当てる。

2 2D3D計量形態学

2.1 一般的な位相幾何学を核とした定量画像解析

結晶粒径や面積率あるいは連結性などの材料組織の特徴量 は人類がその物理的意味を理解できる特徴量といえる。この 物理的に意味のある特徴量の抽出については、前報¹⁾に詳し く書いているので、興味がある方は参照願いたい。

2.2 パーシステントホモロジーを核とした定量画像解析

完全に閉じた穴や空洞の解析にはオイラー標数や種数 (Genus) が有用であるが、材料組織では不完全な穴や空洞 が特性に影響を与える場合があり、その定量評価が重要であ る。このような不完全な穴や空洞の解析にパーシステントホ モロジー²⁾が用いられる。Fig.1 (a) に示すように、分散する 点を少しずつ太らせていくと、やがて半径R=r1で点と点が 連結し、その後穴ができる。またここには示さないが、三次 元の場合にはさらに太らせていくと空洞ができる。一層さら に太らせていくと、穴や空洞はやがてR=r2でふさがって消 滅する。線、穴、空洞成分をh0, h1, h2成分と書くことにし て、その発生時期 (r1) と消滅時期 (r2) を太らせた点の半径 (通 常はピクセル数)を使って表現したものがパーシステント図 (Fig.1 (b)) である。r2-r1はおおよそ潜在的な穴の直径に相 当する。寿命(=消滅時期-発生時期)が大きいほど、本質的 (ロバスト) な穴あるいは空洞と考えられる。このロバストな 穴はパーシステント図上では対角線から離れた点として現れ る。また各点の寿命をFig.1 (c) に示すバーコード図で表現 する場合もある。三次元の解析例をFig.2に示す。

パーシステント図のままでは特徴量として取り出すことは 難しいが、パーシステント図にx,y方向に一定間隔のグリッ ドを切り、その各グリッド内のプロット数をカーネル密度と して算出すると(ベクトル化していることになる)、グリッ ド番号が記述子となり、カーネル密度がその強度となる。こ うすることで、機械学習などのデータとして取り扱うことが できる。更に、対角線からの距離によって、プロットの重み

* 本内容は日本表面真空学会編『図説 表面分析ハンドブック』に掲載されたものと重複する内容を含みます。



Fig.1 2D persistent homology analysis.



Fig.2 3D persistent homology analysis.

づけを行ったうえで、ベクトル化した方 (パーシステントイ メージ: PIと呼ばれる) がベクトル情報により物理的意味を 持たせることができる。PIは式 (1) で与えられる³⁾。

 $PI = \sum_{h=1}^{p} w(b_h, d_h) K_h$ (1)

ここでpは1あるいは2の値をとり、リング、空洞に対応する。 $b_h \ge d_h$ はそれぞれリングあるいは空洞が生成、消滅するサイズであり、 K_h はカーネル密度である。重み係数w(b_h , d_h)は式(2)で与えられる。Cは定数である。

$$w(b_h, d_h) = \arctan\left(C\left(d_h - b_h\right)^p\right)$$
(2)

3.1 二点相関関数 (Two-point correlation function: TCF) 画像とは各 (x, y) 座標における輝度値 (あるいはRGB値) の集合である。この輝度値のパターンを解析することによ り、その画像の特徴が評価できる。画像の中の一点一点は銀 河の中における星と類似しており、星の分布を数学的に表現 する際に用いられている二点相関関数が画像の中の輝度値分 散の解析にも有用である⁴⁾。二点相関により、ある距離rの場 所に同じ輝度値を持つ点のペアが幾つあるかを解析でき、r が記述子であり、その量がペアの数である。したがって、多 くの記述子があることになり、画像の特徴を簡潔に表現す



Fig.3 An explanation of two-point correlation function analysis.

るには少々問題があるが、主成分分析やオートエンコーダな どによる次元削減の方法を併用して特徴量とすることがで きる。Fig.3 (a) は6×6ピクセルの中に4つの黒点があり、こ こでは黒点の二相相関を考える(周期境界条件を仮定する)。 r=3に4つのペアが存在し、 $r=\sqrt{18}$ に2つのペアが存在す る。Fig.3 (b) では、 $r = \sqrt{2}, \sqrt{5}, \sqrt{18}$ にそれぞれペアが1, 4, 1つ存在する。画像(a)と(b)が記述子rで定量評価できて いるということである。より複雑な画像に関しては、次の二 点相関関数 (S₂ (r)) によりこの二点ペアの数 (P (r)) が計算 できる。I(i),(j)は左隅からi,j番目の座標の輝度値である。 二値化画像の黒点を対象とする場合は、黒点のI(i)=1であ り、周囲の白い領域ではI(i)=0となる。二点相関関数によ り、フェライト-マルテンサイト二相組織鋼の組織を解析し た結果をFig.4に示す。なお、P(0)の二倍は黒点ピクセルの 数であり、したがって全ピクセル数で除することにより面積 率に対応する。

二点相関関数は自動で記述子rを抽出する素晴らしい方法で あるが、記述子rとその量 (P(r))の物的な意味が理解しに くいことと、複雑な画像の違いを表現できるのかについては 不明な点も多く、今後の評価を待ちたい。



Fig.4 Analysis result by two-point correlation function.

3.2 自己相関関数·相互相関関数

組織画像に周期性がある場合、原画像から画像をずらし ていくとある距離ずらしたところで画像がよく一致すると ころがある。この画像の重なりとずらす距離 (lagという。二 点相関関数のrと同義。)の関係を表現するのが自己相関関 数 (Auto-correlation function : ACF) である。同じ画像では なく、異なる画像の類似度を評価する場合が相互相関関数 (Cross correlation function : CCF) というが、関数はACF と同じである。ACF, CCFは次の関数 $z(\tau)$ で表され、 x_i はi 位置における画像の輝度値、 x_{i+h} はhだけずらした画像の輝 度値である。

 $z(h) = \int_{-\infty}^{\infty} x_i x_{i+h} dt$ (4)

Fig.5 (a), (b) にチェック模様の画像のACF, CCF解析の結 果を示す。ここでは輝度値を左上隅から右下隅まで一列に並 べてベクトル化し、その相関を調べている。

なお、N次の自己相関関数は次式で与えられる。

 $x(a_1,\dots,a_N) = \int f(r)f(r+a_1)\cdots f(r+a_N)dr$ (5)



4.1 正規化相互相関係数

二つの画像の同じ場所における輝度値 (x_{ij}, y_{ij})の相関を調 べ、それを全領域にわたって調べているのが相互相関係数で あり、それを輝度値の和で正規化しているものが正規化相互 相関係数である。また、二種類の画像間で全体的に輝度値が 異なっていても相関を調べることができるようにそれぞれの 画像の輝度値の平均値をひく場合があり、英語ではこの関数 をzero-mean normalized cross-correlationと呼び、次式で与 えられる⁵⁾。

正規化相互相関係数による画像比較は、同じ座標における 輝度値の一致を評価していることから、同じ画像でも少しず れるとその値が急激に小さくなってしまい、位置のロバスト 性が低い手法といえる。4枚の組織像に対して、正規化相互 相関係数を計算した結果をFig.6に示す。これに対して、前述 した自己相関関数・相互相関関数は、2枚の画像をずらした 場合(Fig.6右下図の裾野の部分)の一致度を併せて評価して いることが特徴である。

4.2 相互情報量

相互情報量 (mutual information: MI) とは、Bの画像の特 徴を知る前後でのAの画像の特徴の曖昧さ(前:H(A),後: H(A | B))の減少量をいう⁶⁾。別の表現をすると、Bの画像の 特徴を知ったうえで得たAの画像の特徴に関する情報量とも いえる。MIは次式で与えられる。単位はビットである。p(a_i)



Fig.5 Analysis result by normalized cross-correlation coefficient and cross-correlation function.



Zero-mean normalized cross-correlation coefficient

Fig.6 Analysis result by normalized cross-correlation coefficient and cross-correlation function.

はi座標における輝度値aが生じる確率であり、輝度値aを知る ことによって得られる情報量は-log₂pで表される。個々の座 標における輝度値a_iの値を知った時に得られる平均情報量 (H (A)) は、それぞれの輝度値となる確率を重み付き平均した値 になり、これを平均情報量 (あるいは情報エントロピー) と呼 ぶ。輝度値が大きくばらつく画像は情報エントロピーが高く、 コントラストが小さい画像はエントロピーが小さい。

$$\begin{split} \mathrm{MI}(\mathbf{A},\mathbf{B}) &= \mathrm{H}(\mathbf{A}) - \mathrm{H}(\mathbf{A} \mid \mathbf{B}) = -\sum_{i=1}^{m} p\left(a_{i}\right) \log_{2} p\left(a_{i}\right) \\ &+ \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{m} p\left(a_{i},b_{j}\right) \log_{2} p\left(a_{i} \mid b_{j}\right) \\ &= -\sum_{i=1}^{m} \left\{ \sum_{j=1}^{n} p\left(a_{i},b_{j}\right) \right\} \sum_{j=1}^{n} \log_{2} p\left(a_{i}\right) \\ &+ \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{n} p\left(a_{i},b_{j}\right) \log_{2} p\left(a_{i} \mid b_{j}\right) \\ &= -\sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{n} p\left(a_{i},b_{j}\right) \log_{2} p\left(a_{i}\right) \\ &+ \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{n} p\left(a_{i},b_{j}\right) \log_{2} p\left(a_{i} \mid b_{j}\right) \\ &= \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{n} p\left(a_{i},b_{j}\right) \log_{2} \frac{p\left(a_{i} \mid b_{j}\right)}{p\left(a_{i}\right)} \\ &= \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{n} p\left(a_{i},b_{j}\right) \log_{2} \frac{p\left(a_{i},b_{j}\right)}{p\left(a_{i}\right)} \end{split}$$

相互情報量による画像比較は、正規化相互相関係数と同様 に、同じ座標における輝度値の一致を評価していることか ら、同じ画像でも少しずれるとその値が急激に小さくなって しまい、位置のロバスト性が低い手法といえる。

4.3 最尤法による混合正規確率密度分布解析

組織画像の輝度値 (x_i) をヒストグラム化し、そのヒストグ ラムが二つの正規分布確率密度関数 (式 (2))の重ね合わせ でフィットできるという仮定の下、その平均値 (μ) 、標準偏 差 (σ) 、二つの正規分布関数の割合 (lambda)を最尤法で求 めて⁷⁾、二つの画像のそれぞれ三つの値の類似性より材料組 織の類似性を評価することができる。

$$p(x_i) = N(\mu, \sigma^2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} exp\left\{-\frac{(x_i - \mu)^2}{2\sigma^2}\right\} \dots (9)$$

最尤法とは、正規分布などの確率密度関数に従うデータが生 じる確率 (密度)の同時確率 (連続データの場合同時分布)

$$L(\mu,\sigma) = \prod_{i=1}^{n} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^{2}}} \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{(x_{i}-\mu)^{2}}{\sigma^{2}}\right)$$
(10)

が最大になる時の、確率密度関数のパラメータ(正規分布の 場合は平均値 (μ)と標準偏差 (σ))を最適解とする尤度法 を意味する。正規分布の尤度は積で与えられるが、その計算 は煩雑であるので、通常、対数尤度を最大にするパラメータ (μ , σ)が求められる。

$$\log(L(\mu,\sigma)) = \log(\prod_{i=1}^{n} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^{2}}} \exp(-\frac{1}{2} \frac{(x_{i}-\mu)^{2}}{\sigma^{2}}))$$
$$= -\frac{N}{2} \log(2\pi) - \frac{N}{2} \log(\sigma^{2}) - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} \frac{(x_{i}-\mu)^{2}}{\sigma^{2}}$$
.....(11)

本手法も、2枚の画像があるだけで画像比較ができ、複数の

画像を使った学習用データが不要である。Fig.6で用いた4枚 の画像を対象に輝度値のピークフィッティングを行った例を Fig.7に示す。

4.4 組織特徴量の主成分分析

画像から物理的に意味のある特徴量を複数抽出し、その特 徴量を主成分分析 (Principal component analysis: PCA)⁸⁾ するということは、多次元情報を低次元情報に圧縮して類似 性を評価することを意味する。主成分分析では、多次元デー タを例えば二次元座標に射影する際に、分散が最大および二 番目となる軸を探し、その二軸を主成分軸として元データを 射影する(一例をFig.8に示す)。類似しているデータは主成 分座標で近くにプロットされる。主成分軸を見つけるという ことは、固有値と固有ベクトルを見つけるということと等価



Fig.7 Gaussian mixture model powered by likelihood method.

Class	2D Count	2D %Areaの 平均値	2D Circ. の平均値	2D Solidityの 平均値	楕円長径 の平均値	楕円短径 の平均値	楕円長径 角度の平 均値	最大フェ レ径の平 均値	最小フェ レ径の平 均値	最大フェ レ径角度 の平均値
A=1	141	11.664	0.712	0.822	17.761	9.716	98.828	19.779	11.624	100.068
B=2	171	12.167	0.723	0.826	16.494	9.03	89.315	18.341	10.712	97.304
C=3	136	20.842	0.611	0.789	24.845	11.631	88.477	28.097	14.502	87.439
D=4	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0



Fig.8 Principal component analysis.

である。本手法では、複数の画像の特徴量の相対比較で、対象とする2枚の画像を比較するので、複数の画像の特徴量が必要である。多次元データをもとの空間で一度PCAしても良好な主軸を見つけることができない場合がある。その場合は、元の空間をより高次の空間に射影したうえでPCAし主軸を見つける手法があり、カーネル主成分PCAといわれる。 データ間に非線形の関係がある場合の主成分を見つけたい場合に、カーネル主成分分析は有効といわれている。

主成分分析と類似する方法で、教師なし学習のニューラル ネットワークを使った方法としてオートエンコーダがある が、詳細は割愛する。

4.5 組織特徴量の自己組織化マップ

自己組織化マップ (self-organizing map : SOM)⁹ は、 PCAと同様に多次元データを低次元空間に射影する手法で ある。PCAが単に数学的に分散が最大となる主軸を見つけて データを一括射影したのに対して、SOMでは次に述べるように特徴量が物理的に類似しているデータを徐々に近くに集めてくるという手法である。SOMでの処理過程は以下のとおりである (Fig.9)。

①【勝者ニューロンの決定】n個の特徴量を持つ元データ*X_i*と同様にn個の特徴量を持つ射影空間座標ニューロン*M_{i,j}*間のユークリッド距離を評価し最も近いニューロンを勝者 ニューロンとする。ここでは例として*M*_{3,6}を勝者ニューロン とする。

$$\min(d) = \|\boldsymbol{X}_{i} - \boldsymbol{M}_{i,j}\| = \sum_{n=1}^{n} (x_{i,n} - m_{i,j,n})^{2}$$
 (12)

②【ニューロンの修正】ニューロンの特徴量を、元データを より一層表現するように、式 (13) に従って修正する。

$$M_{3,6}^{new} = M_{3,6} + \alpha \left(X_i - M_{3,6} \right) \qquad (13)
 \alpha: 学習率 (0 < \alpha < 1)$$



Fig.9 Self-organizing map.

③【近くのニューロンの修正】勝者ニューロンの近くのニュー ロン (例えば $M_{2,6}$)を式 (14) に従って勝者ニューロンほどで はないが修正する。ここでg(e)は近傍関数式 (15) であり、 二次元ニューロンマップ上での勝者ニューロンとの距離を表 現する。 $\sigma(t)$ は総回数Tとした時の学習回数tを変数とする 単調減数関数であり、最も簡単な関数としては1-t/Tがある。 cは係数である。

②③を繰り返すうちに、内容が類似しているデータはこの射影空間上で近くにプロットされるようになる。本手法では、 複数の画像の特徴量を学習した上で、対象とする2枚の画像 を比較するので、複数の画像の特徴量が必要である。

4.6 ディープラーニングによる組織識別

画像にフィルターを与えて特徴量(人間が想像する物理的 に意味のある特徴量とは異なる)を抽出し、その特徴量と物 体名をニューラルネットワークなどの識別器で関連付けると いった点では、機械学習型の画像処理¹⁰⁾とディープラーニン グは同じである(前報¹⁾で詳細は説明)。ただし、機械学習型 画像処理では専門家が予め設計したフィルターをあたえるの に対して、ディープラーニングでは特徴量が物体名にできる だけ関連付けられるようにコンピュータが自ら学習してフィ ルターを設計しそれを使う点が異なる。特徴量を抽出する過 程では、画像(輝度値の行列)にフィルター(小さな行列)を 与えて内積値をとり、フィルターを適用する画像の場所を少 しずつ変えながら同様な操作を繰り返して、第1段階目の特 徴量抽出を行う¹¹⁾。この過程を畳み込み(convolution)とい う。続いて、畳み込みで得た特徴量行列を小分割し、その中 の代表値(例えば最大値)を抽出する。この過程をプーリン グという。畳み込み、プーリングにより、当初大きかった画 像の輝度値の行列から次元圧縮された特徴量が得られる。複 数のフィルターを与えて、複数の特徴量を表現する行列を得 る。この畳み込み、プーリングを繰り返した後、最終的に複 数の小さな行列を全結合しベクトル化し、その回答が物体名 となるようにその間をニューラルネットワークを用いてモデ ル化する。

この手法は物体の類似性の評価というよりは、物体識別に 向いている。本手法では、複数の画像の特徴量を予め学習さ せておいた上で対象とする画像を識別するので、複数の画像 が必要である。著者らは材料組織の認識に畳み込みニューラ ルネットワーク (Convolutional neural network : CNN) が 有用であることを報告した (Fig.10)¹²。

4.7 画像中の対象領域の自動抽出技術の重要性

輝度値についても、特徴量抽出についても、組織画像中から対象領域をセグメンテーションした後で行われる解析であるが、このセグメンテーションに従来大変時間を要している 点が問題である。ここに様々な機械学習の手法を適用して、 自動セグメンテーションをする手法として、機械学習型画像 処理, region with convolutional network (R-CNN)¹³, fully



Fig.10 Microstructure recognition by convolutional neural network¹²⁾.

convolutional network (FCN)¹⁴⁾ などがある。R-CNN も FCN もエンコーディング過程で画像を畳み込んで次元を削減し、 それをデコーディングして画像抽出を行っているため細かい 部分の領域抽出は必ずしも得意ではないが、元画像と畳み込 んだ画像の両方の情報を使ってデコーディングする新しいア ルゴリズムとしてU-Netがあり、高精度の領域抽出法として 注目を集めている。U-Netはエンコーディング過程では全層 畳み込みを行っているのでFCNの一種とみることができる。

(5) 材料情報統合システム

以上に述べた画像解析を手動で行っていては時間がかかり すぎるが、近年ではプログラミング言語PythonやRの様々 なパッケージが用意されており、コンピュータ上で自動解析 することが可能である。材料関係では、画像解析、組織一特 性間の順解析および逆解析を一気通貫で行うことができる材 料情報統合システム MIPHA¹⁵⁾、shiny MIPHA¹⁶⁾が提供され ている。MIPHAは人間が理解できる画像の特徴量抽出を得 意としており、一方 shiny MIPHA は輝度値のパターン解析と パーシステントホモロジー解析、二点相関関数が実装されて いる。本稿で用いた図の大半は shiny MIPHA を使って作成し たものである。

材料組織画像の特徴量を抽出することは、材料工学の基本 であり、また昨今のデータサイエンスによる材料開発の促進 を進めるうえでも重要である。その特徴量には、人類が物理 的意味を理解できる特徴量と、輝度値のパターンがある。ま た、画像の類似性を定量的に評価することも特性を理解する うえで有益と思われる。

謝辞

本研究の内容の一部は名古屋大学大学院材料デザイン工学 専攻の福井ちひろ君の協力により行われたものである。ここ に感謝の気持ちを表する。

参考文献

- 1) 足立吉隆, Zhi-Lei Wang, 小川登志男:ふぇらむ, 25 (2020)
 9, 569.
- 2) H. Edelsbrunner and J. Harer : Computational Topology : An Introduction, American Mathematical Society, (2010)
- H. Adams, S. Chepushtanova, T. Emerson, E. Hanson, M. Kirby, F. Motta, R. Neville, C. Peterson, P. Shipman and L. Ziegelmeier : J. Mach. Learn. Res., 18 (2017), 1.
- 4) Y.Jiao, F.H. Stillinger and S. Torquato : Phys. Rev. E, 77 (2008), 031135.
- 5) A.Kraskov, H.Stögbauer and P.Grassberger : Phys. Rev. E, 69 (2004), 066138.
- 6) J.D.Hamilton : Time series analysis, NJ : Princeton University press, Princeton, 2 (1994), 690.
- 7) J. Martin and J. L. Crowley : Comparison of correlation techniques, Intelligent Autonomous Systems, (1995), 86.
- 8) H. Hotelling : J. Educ. Psychol., 24 (1993), 417.
- 9) T.Kohonen : P. IEEE, 78 (1990), 1464.
- 10) I.Arganda-Carreras, A.Cardona, V.Kaynig and J.Schindelin: Trainable Weka Segmentation, http:// imagej.net/Trainable_Weka_Segmentation, (参照日: 2020-1-6)
- 11) Y.LeCun, L.Bottou, Y.Bengio and P.Haffner : Proc. of the IEEE, (1998), 1.
- 12) 足立吉隆, 田口茂樹, 弘川奨悟: 鉄と鋼, 102 (2016) 12, 722.
- 13) R.GirshickandJ, P.N.Fotheringham-Smytheand and G.Gamow : In International Conference on Computer Vision (ICCV), (2015)
- 14) J. Long, E. Shelhamer and T. Darrell : Proc. IEEE Conf. Computer Vision and Pattern Recognition, IEEE, USA, (2015), 3431.
- 15) Z. L. Wang and Y. Adachi: Mater. Sci. Eng. A, 744 (2019)28, 661.
- Z.L. Wang, T.Ogawa and Y.Adachi : Journal of Advanced Theory and Simulations, 1900177 (2019), 1.

(2020年1月7日受付)