

実 験 報 告 書

題 目 B1. 機械学習を用いた金属材料の組織解析と物性評価

実 験 実 施 日 (西暦) 2025 年 7 月 8 日

提 出 日 (西暦) 2025 年 7 月 14 日

(再 提 出 日 (西暦) 年 月 日)

報告書作成者

学籍番号 8223036 氏名 栗山淳

共同実験者

学籍番号	8223043	氏名	小山天河
学籍番号	8223096	氏名	松山航
学籍番号	8223004	氏名	天野怜
学籍番号	8223078	氏名	南茂結衣
学籍番号		氏名	

東京理科大学先進工学部マテリアル創成工学科

実験指導者記入欄	
提 出 日 /	署名
再提出指定日 /	
再 提 出 日 /	署名

チェックリスト

- ☑ 「結論」が的確にまとめられているか。
- ☑ 「結論」の長さは適切か。日本語に誤りがないか(論旨，文法，単語)。
- ☑ 「結論」と「実験結果」の整合性がとれているか。
- ☑ 「結論」を導くために必要十分かつ適切な「実験結果」の表現が過不足なくされているか。
- ☑ 「実験結果」はわかりやすく，見やすく，正確に表現されているか。
- ☑ グラフの軸，表の項目，グラフや表のタイトルに漏れはないか，適切か。
- ☑ 有効数字は適切か。単位が漏れていないか。
- ☑ (写真を用いる場合) 写真の明るさやコントラストは適切か。
- ☑ 「実験結果」を得るために必要な「方法」が過不足なく表現されているか。
- ☑ 「目的」が明記されているか。「目的」と「結論」の整合性がとれているか。日本語が適切か。
- ☑ 「なぜこの目的で実験をしたか」が「背景」に的確に表現されているか。日本語が適切か。
- ☑ 必要に応じて適切に参考文献の引用情報が記述されているか。

参考文献：議論の裏付けを与えるものであるから，実験題目に関係がある文献を偏りがないうようにできる限り引用する。文献の表記方法を参考として下記に記述しておく。

 - 1) 著者名，書籍名，発行所，ページ，発行年
 - 2) 著者名，雑誌名，巻，号，ページ，発行年
- ☑ 全体としてわかりやすいか。
- ☑ 「背景」が1ページを超えていないか。
- ☑ 「実験方法」が1ページを超えていないか。
- ☑ 「結論」が100字程度で記されているか。

1. 背景・目的

近年、人工知能（AI）技術の急速な進展により、さまざまな分野でデータを活用した効率的な解析・設計が実現しつつある。とくに、材料開発の分野では、従来の「経験と試行錯誤」による設計アプローチから、「データ駆動型」のアプローチへと大きく舵が切られている。この新しい手法は「マテリアルズ・インフォマティクス」と呼ばれ、近年の材料工学における革新的な研究手法のひとつである。MI とは、材料の組成、加工条件、構造、物性などの多次元データを収集・統合し、機械学習や統計的手法を用いて有用な知見や予測モデルを導き出すことで、材料開発のスピードと効率を飛躍的に高める技術である⁽¹⁾。MI の応用は幅広く、合金やセラミックス、高分子材料に至るまでさまざまな材料に対して研究が進んでいる。とくに近年注目されているのが、「微細組織」と「材料特性」の関係性をデータとして扱い、機械学習でモデル化・予測するという手法である。たとえば、金属材料においては、焼なましや冷間加工といった熱・機械処理の条件によって、材料内部に形成される結晶粒の大きさ、形状、配向（テクスチャ）、析出物の分布、双晶、転位密度などの微細組織が大きく変化する。これらの組織は、引張強さ、降伏応力、延性、疲労強度といった力学特性に密接に関係しており、適切に設計・制御することで、目的に合った性能をもつ材料を得ることができる。しかし、こうした微細組織は非常に複雑で、かつ高次元な情報を含んでおり、人間の目視や直感による評価には限界がある。従来の金属組織解析では、光学顕微鏡や電子顕微鏡で観察した画像を専門家が分類・評価していたが、これは時間がかかるうえ、評価者によって結果がばらつくといった問題があった。そこで登場したのが、画像認識を活用した機械学習による解析である。近年は、画像からテクスチャ情報や粒径分布を自動的に数値化し、それらを機械学習モデルに入力することで、特性の定量的予測が可能になってきている。これにより、熟練の経験に頼らずとも、材料設計に必要な組織－物性関係を高精度に解析できる可能性が広がっている。さらに、近年は深層学習（ディープラーニング）を含む画像解析技術の進歩により、従来では識別が難しかった微細な組織差を判別したり、材料の製造履歴までを推定する研究も進んでいる。実際に、鉄鋼材料やアルミニウム合金などの構造材料において、引張特性や耐摩耗性、加工硬化特性の予測が可能となっており、研究成果は産業応用にも広がりつつある⁽¹⁾。このように、金属材料の微細構造情報を定量的に捉え、それを活用して材料特性を予測するというアプローチは、材料研究の在り方そのものを変える大きな転換点にあると言える。このような社会的・学術的背景のもと、本実験では、金属組織の観察画像から得られる微細構造情報を定量化し、機械学習を用いて力学特性を予測するという一連のプロセスを実践的に学ぶ。実験では、画像データを用意し、特徴量を画像処理を通じて抽出し、それを回帰分析や分類などの機械学習モデルに入力する。これにより、試料の力学的性質を非破壊で予測する可能性や、加工条件と組織の関係などを見いだすことができる。このような一連の作業を通じて、材料の組織－物性関係を統計的かつ定量的に理解する能力を養うだけでなく、データ駆動型材料設計の考え方とその意義を実感することができる。

本実験の目的は、金属組織画像から得られる定量情報をもとに機械学習を適用し、微細構造と材料特性の関係を様々な手段で解析することで、それらの解析法の特徴や予測精度を明らかにすることである。

2. 原理

2.1 フェーズフィールド法⁽²⁾

フェーズフィールド法は、界面の明示的な追跡を必要とせず、層変態や微細組織の真かなどの現象を連続場として記述できる数値解析手法である。この方法では、フェーズフィールド変数と呼ばれる連続的な変数 $\phi(r, t)$ を用いて、材料の各領域の状態を表す。例えば、 $\phi = 1$ 、を相 A、 $\phi = 0$ を相 B とし、その中間の値が界面を意味するように設計することで、相境界を自然に表現できる。フェーズフィールド法では、まず系の自由エネルギー汎関数を定義し、一般には下の式のような形をとる。

$$F[\phi] = \int \left[f(\phi) + \frac{\kappa}{2} |\nabla \phi|^2 \right] dV \quad (2.1.1)$$

この式は、局所的な自由エネルギー密度 $f(\phi)$ に加えて、空間的な変化を表す勾配項 $|\nabla \phi|^2$ を含み、 κ は界面エネルギーに関する係数である。このようなエネルギー汎関数に基づいて形の時間発展を導くとき、変数 ϕ が保存される場合には、Cahn-Hilliard 方程式が用いられる。これは化学ポテンシャル $\mu = \frac{\delta F}{\delta \phi} = \frac{df}{d\phi} - \kappa \nabla^2 \phi$ を用いて、以下のような形をとる。

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \nabla \cdot (M \nabla \mu) \quad (2.1.2)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \nabla \cdot \left[M \nabla \left(\frac{df}{d\phi} - \kappa \nabla^2 \phi \right) \right] \quad (2.1.3)$$

ここで M は移動度を示す。Cahn-Hilliard 方程式は、相分離過程や微細組織の発達を記述する際に広く用いられており、フェーズフィールド法の中心的な役割を担っている。

2.2 機械学習⁽³⁾

機械学習とは、与えられたデータから規則性や関係性を自動的に学習し、未知のデータに対して予測や分類を行う手法である。人間があらかじめルールを明示的に定義するのではなく、コンピュータが大量のデータを基に経験的にルールを獲得していく点が特徴である。特に、材料 k 額における機械学習は、組成や微細構造、加工条件といった多変量データと、強度・導電性、熱伝導率などの物性値との関係を統計的にモデル化することで、材料特性の予測や新材料の発見を加速する手段として注目されている。

機械学習の基本的な枠組みでは、入力(説明変数)と出力(目的変数)の関係を学ぶ「教師あり学習」が広く使われている。例えば金属材料の組織画像から流刑や形状、黒鉛球の数などの特徴量を抽出し、それらを入力として与え、引張強さや硬さなどの物性値を出力とすることで、入力と出力の関係を学習する回帰モデルを構築することができる。このとき、学習されたモデルは、未知の組織画像に対しても物性を推定する予測器として機能する。

学習の際には、誤差(予測と実測の差)を最小するようにモデルのパラメータを調整する。例えば、線形回帰では、パラメータを調整して入力と出力の間の線形関係を最もよく表す直線を求める。一方、より複雑な関係性を扱うために、ランダムフォレスト、サポートベクターマシン(SVM)、

ニューラルネットワークといった多様なアルゴリズムが用いられることもある。

本実験においても、金属組織の画像データから特徴量を抽出し、それを基に機械学習によって物性を推定するプロセスを通じて、データ駆動型の材料評価と設計の基礎を理解することに使われている。このように、機械学習の原理は、単なる計算技術にとどまらず、材料開発の新しいパラダイムを支える重要な手法として位置づけられている。

2.2.1 教師なし機械学習⁽⁴⁾

教師なし機械学習とは、入力データに対して出力データを与えずに、データの構造や特徴を自動的に抽出する手法です。主に、データの分類や次元削減、異常検知などに使われ、材料科学などの分野でも、組織画像や測定データからパターンや蛍光を見出すために活用されている。

まず、PCA は次元削減の代表的な手法であり、多変量データを直交する主成分軸に変換して、データの分散が最も大きい方向を優先的に取り出す。これにより、元の高次元データの構造を保ちながら、重要な特徴だけを低次元空間で表現することができる。例えば、金属組織の画像から抽出した複数の特徴量を 2 次元や 3 次元に圧縮して視覚化することで、パターンの違いを直感的に理解しやすくなる。

次に、k-means は、データを k 個のグループに自動的に分けるアルゴリズムである。初期に設定したクラスター数 k に対し、各データ点が最も近い重心に所属するように繰り返し分類と更新を行い、クラスター内の分散を最小化する。この方法により、似た特徴を持つデータ同士を同じグループに分類することができる。材料の分類や品質検査において、似た組織構造や物性を持つ試料のグループ化などに応用される。ただし、k-means ではクラスター数 k を事前に決める必要があるため、その妥当な値を判断するためにエルボー法が用いられる。エルボー法では、クラスター数 k に対して「クラスター内誤差平方和 (SSE)」を計算し、k を増やすごとにその値がどのように減少するかをグラフにする。そのプロットが「肘」のように折れ曲がる点(急激な減少が緩やかになる点)が最適なクラスター数とされる。これにより、無駄にクラスター数を増やして過剰分類することを防げる。

このように、教師なし学習は、あらかじめ答えが分かっているデータに対して、内在する呼応増や関係性を発見するための重要な手法であり、材料評価や分類におけるデータ解析にも有効である。

2.2.2 教師あり機械学習⁽⁴⁾

教師あり機械学習とは、入力データと出力データをセットで与えて学習させる手法であり、モデルはその関係性を学び、未知のデータに対して予測を行うことを目的とする。材料科学などの分野では、組織画像や数値データを基に、引張強さや硬さなどの物性を予測するモデルを構築する場面で広く使われている。

その基本的な手法の一つが線形回帰である。線形回帰では、入力データ x に対して出力データ y が一次関数として表せると仮定し、次のような形で予測式を作る

$$y = \omega_0 + \omega_1 x_1 + \omega_2 x_2 + \cdots + \omega_n x_n \quad (2.2.2.1)$$

ここで、係数 ω_i を誤差が最小となるように学習する。この方法はシンプルで計算も高速だが、過学習が起きやすく、特に説明変数が多い場合やデータの変動が大きい場合には安定性に欠ける。それを改善するのが Ridge 回帰である。Ridge 回帰は、線形回帰の式にさらに項を加えることで、モデルの複雑さを抑え、過学習を防ぐ手法です。具体的には、以下のように目的関数に $\lambda \sum \omega_i^2$ を加える。

$$\text{最小化する誤差関数: } \sum (y_i - \hat{y}_i)^2 + \lambda \sum \omega_i^2 \quad (2.2.2.2)$$

この λ の値が大きいほど係数が小さく抑えられ、モデルの柔軟性が制限される。それによりモデルが複雑になることを防ぐ。

一方で m 入力画像のような高次元かつ空間的な構造を持つデータの場合には、より強力な表現力を持つ深層学習が必要とされる。特に、画像処理に特化した代表的な手法が畳み込みニューラルネットワーク(CNN)である。CNN は、画像に含まれる局所的な特徴(模様など)を自動的に抽出し、相を重ねることで複雑なパターンを学べる。具体的には、画像から特徴マップを作り、特徴を圧縮し、最終的な予測を行うという構成で、画像分類や物性予測などに広く応用される。

また、がぞ王をそのまま扱うのではなく、FFT(高速フーリエ変換)によって前処理を行うこともある。FFT は、画像中の空間情報を周波数成分に変換する手法であり、周期的な構造やパターンの強度を抽出するのに有効である。例えば金属組織画像のような規則性を持つパターンでは、FFT によりその規則性や異方性を数値として表せるため、CNN に入力する前の有効な特徴量として利用されることがある。

このように、教師あり学習では、線形回帰や Ridge 回帰によって数値特徴量と出力の関係をモデル化するとともに CNN や FFT を活用することで画像のようなデータからも高精度な予測が可能となる。

3. 方法

今回の実験では金属材料の相分離現象をフェーズフィールド法によって再現し、そのシミュレーションの結果からその金属結晶の組織解析と物性評価を行った。

まず、今回の実験で使うデータの生成を行った。具体的には仮想的な A-B 合金のスピンオーダー分解や Cahn-Hilliard 方程式を用いたフェーズフィールドシミュレーションを実施した。

このシミュレーションでは初期濃度 $c_0 = 0.3 \sim 0.7$,モビリティ $M = 1[m^3/J \cdot s]$,勾配エネルギー $\kappa = 0.5[J/m^3]$,エネルギー障壁の大きさ $A = 0.2 \sim 1.2[J/m^3]$ という条件で行った。

シミュレーションを行い得られたデータはシミュレーションの中で終状態のもののみを取り出し利用した。

このデータを基にして教師なし学習では PCA による次元削減を実施し、データ構造を 2 次元に可視化した。また、k-means により、類似した組織パターンを持つデータを自動的に分類し、クラス数数の決定にはエルボー法を用いた。

今回の実験では画像データから特徴を抽出する手法として FFT を用いた。

教師あり学習では、FFT を行い、特徴を抽出した後、線形回帰、Ridge 回帰、CNN の 3 つのモデルを構築し、物性値の予測を比較した。

線形回帰では FFT 後の画像を 1 次元ベクトルに交換し、物性値の予測を行った。

Ridge 回帰では FFT の有無による予測の精度の違いを比較した。

CNN では画像から直接エネルギー値を予測するモデルを構築した。

4. 結果・考察

4.1 教師なし機械学習

教師なし学習では PCA を行った。PCA により次元削減された散布図は以下の図のようになった。

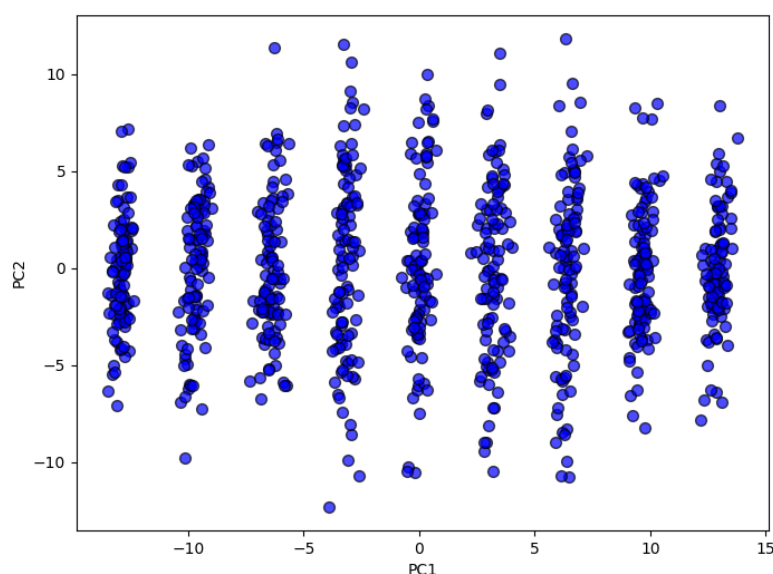


図 4.1.1 PCA の結果散布図

この図は、PCA（主成分分析）によって高次元のデータを 2 次元空間に射影した結果を示す散布図である。それぞれの点は、元のデータセット内の 1 つの試料に対応しており、PCA によって求められた第 1 主成分（PC1）と第 2 主成分（PC2）の値に基づいて配置されている。

図を見ると、データ点が PC1 方向に沿って縦に細長い帯状に密集して分布していることがわかる。このことから、PC1 の値に応じて試料がある程度のグループに分かれており、PC1 がデータの構造や分類に強く関与している主成分であると考えられる。一方、PC2 方向には一定のばらつきはあるものの、PC1 ほど明確な帯状の分離は見られない。したがって、PC2 はデータの分類において PC1 ほど重要ではなく、副次的な変動を表している可能性が高いと考えられる。

次に、各成分が得られたデータに対してどれだけの説明能力を持っているかを表す寄与率を確認するため、寄与率をプロットした図を以下の図に示した。

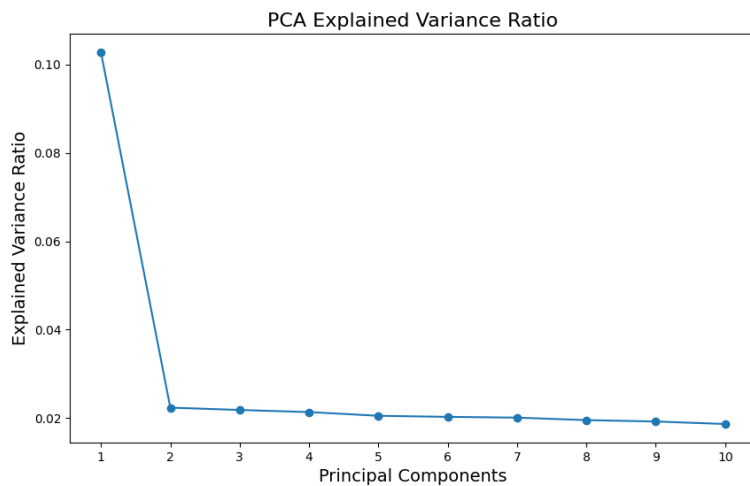


図 4.1.2 各成分の寄与率

この図は、PCA によって抽出された各成分が元のデータの分散をどの程度説明しているか、すなわち寄与率を表したものです。横軸には成分の番号、縦軸にはその成分がどれだけ元のデータに寄与しているかが示されています。実際に図を見てみると第 1 成分が最も高い寄与率を示しており、元の微細組織データが持つ情報において PC1 が最も特徴をとらえていることを示している。

PCA 解析によって得られた図 4.1.1 より、データが PC1 方向に連続的に特徴を変化させていることが分かる。このデータを k-means 法によって類似するパターンを色分けし、グループ化した。まず最初に PCA 解析による図からデータ分布を目視で確認し、PC1 軸方向でいくつかのグループが見られるので、仮にクラスター数を 9 として設定して k-means 法を行った。その結果は以下のようなになった。

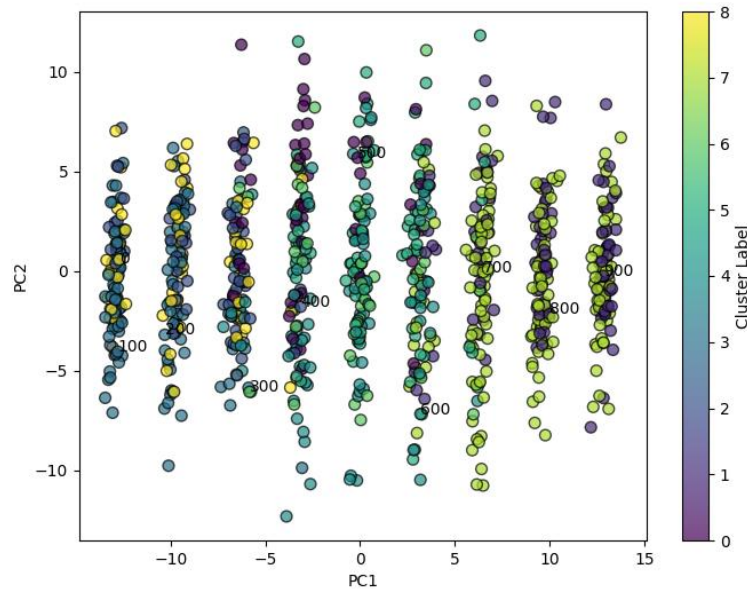


図 4.1.3 クラスタ数が9での k-means の結果

この図から目視で定めたグループと同じように k-means のクラスターも色分けされていないことが分かる。実際に目視で定めたグループの中でも色が異なるデータがいくつも存在しており、クラスター数が9であるということが似た特徴を持つデータ同士をまとめるのに最適でないことが分かる。

このような結果から最適なクラスター数を決定する必要があるため、それを求めるためにエルボー法を適用した。クラスター数を変化させながらクラスター内誤差平方和（SSE）を計算し、それぞれの値をプロットした。その結果を以下の図に表した。

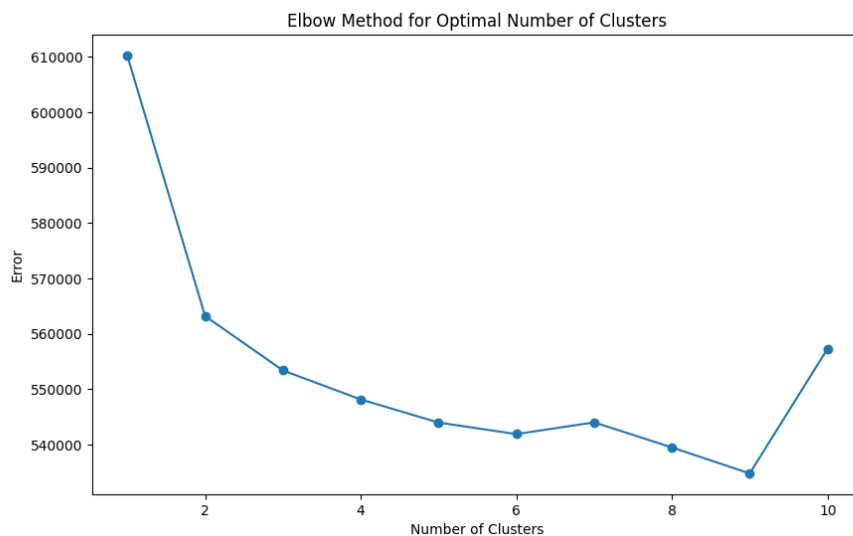


図 4.1.4 クラスタ数を変化させたときの SSE の値

この図がエルボー法の結果を表すグラフであり、この図を見るとクラスター数が2から3になるときにSSEの値の減少が急激に緩やかになることが分かる。よってこの図よりデータの分類分けに最適なクラスター数は3であることが分かる。クラスター数をこれ以上増やした場合は過剰分類となると考えられる。

最適なクラスター数がエルボー法を用いてわかったのでそのクラスター数を用いてもう一度k-means法を実行し、その結果を以下の図に示した。

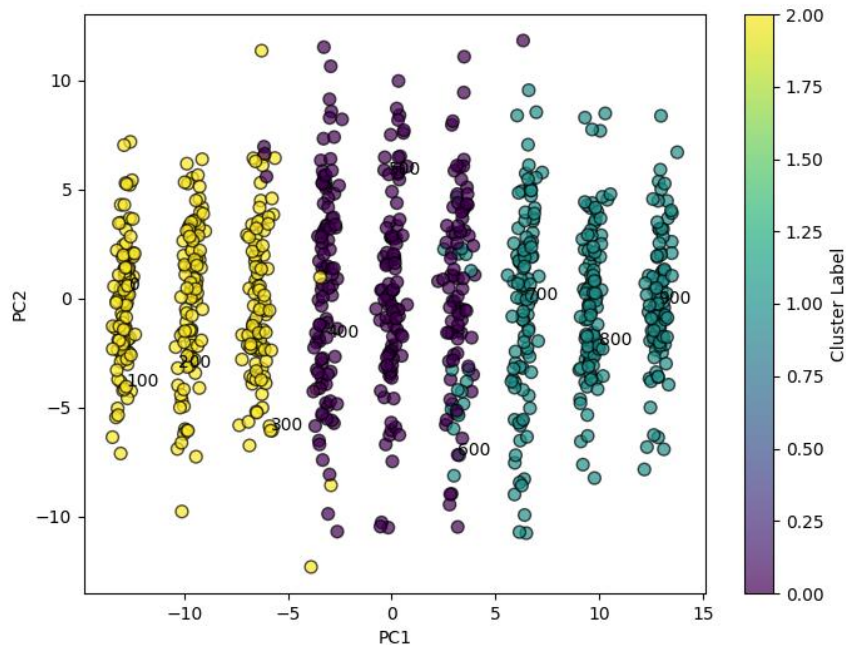


図 4.1.5 クラスター数が3でのk-meansの結果

この図からは、クラスター数を3とした場合の結果が、目視によって定めたグループ分けとおおむね一致しており、特にPC1軸に沿ったデータの分布がよく保持されていることが確認できる。また、各クラスターの分離性も高く、クラスター同士が明瞭に分かれていることから、クラスターリングが有効に機能していると判断できる。

一方で、目視によって定めたグループ数と、k-means法によって得られたクラスター数に違いが生じる場合がある。この原因は、人間の視覚的判断とアルゴリズムによる定量的な分類基準の違いにあると考えられる。人間はクラスターの形状、大きさ、密集度などの視覚的な印象に基づいて直感的にグループを分ける傾向があるのに対し、k-means法はクラスター内の距離（分散）を最小化するという数学的基準に従って自動的に分類を行うため、異なるクラスター数が選ばれることがあると考えられる。

さらに、図 4.1.5 のアノテーション付きプロットを確認すると、PC1 軸の左側には小さい数値のデータが多く、右側には大きい数値のデータが多く配置されていることが分かる。これは PC1 が物性値やシミュレーションパラメータなどの変化を反映していることを示しており、データの本質的な変動要因と強く相関していると考えられる。したがって、k-means 法によるクラスタリング結果もこの主成分軸上の分布に従って分類されており、クラスターの分け方が物性や生成条件とも整合しているといえる。これは、クラスタリング結果がデータの意味的な違いを適切に反映していることを示しており、実験データの解釈にも有用であると考えられる。

4.2 教師あり機械学習

教師なし学習を行った後、FFT 処理を行い、処理した画像データを線形回帰、Ridge 回帰、CNN を適用し、物性値を予測した。

まず、線形回帰を用いて、物性値を予測した結果を以下の図に示した。

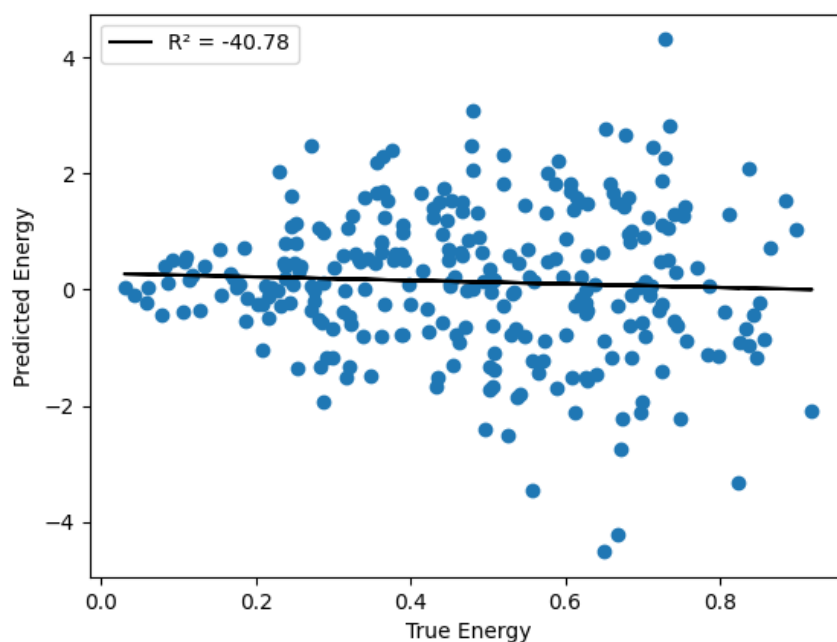


図 4.2.1 線形回帰モデルの予測結果

この図は、線形回帰モデルにおける真のエネルギー値と予測されたエネルギー値の関係を示している。このグラフの R^2 値は1にとっても遠い-40.78という値を示しており、これよりモデルがデータに対して全く適合していないことを示している。本来であれば、プロットされた点が右下がりの直線に沿って分布するはずだが、実際には点は広範囲に散らばっている。この結果からこのデータに対しての線形回帰モデルではモデルが複雑すぎて過学習が起こるため、たとえ FFT によって抽出された値を用いたとしても適切な予測をすることは困難であると考えられる。

次に、線形回帰の過学習の問題を克服するため、Ridge 回帰モデルを用いて物性予測を行った。FFT の前処理を行っていない生の入力画像データで Ridge 回帰を実行した結果を以下の表に示した。

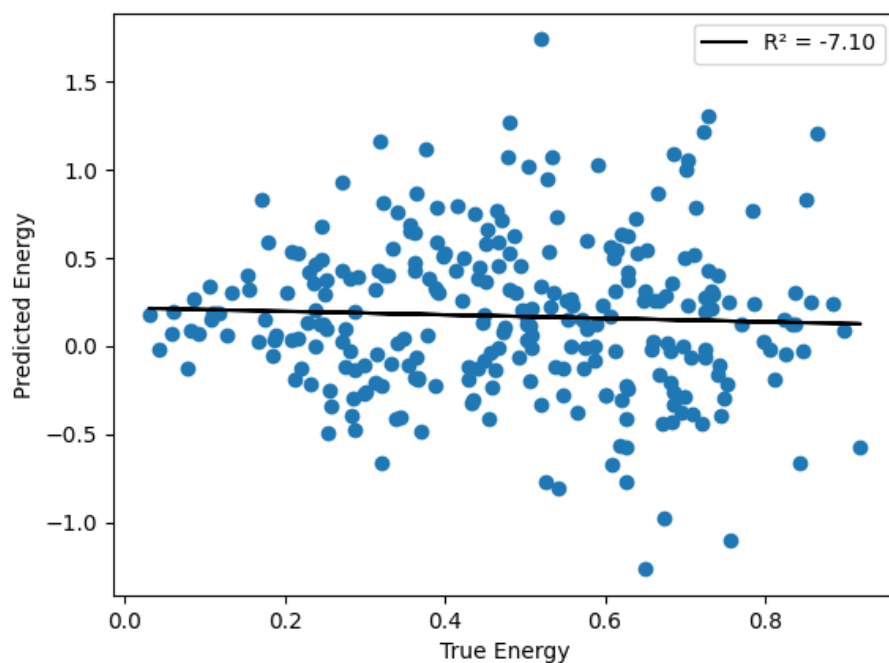


図 4.2.2 Ridge 回帰モデルの予測結果

この図と線形回帰モデルでの予測結果の図を比べると Ridge 回帰の方が R^2 値が 1 に近く、この予測結果の信頼性が大きく改善していることが分かる。この原因は Ridge 回帰では正則化によって各入力の重要度を表す数値を適度に抑え、過学習を防げるためであると考えられる。しかし、この Ridge 回帰モデルでも線形回帰モデルに比べ信頼性は改善されているが、まだ正確であるとは言えない。これは画像情報が多次元かつノイズが多く、Ridge 回帰で正則化を行い、モデルの複雑さを軽減したとしても適切な特徴を学習することが困難であったと考えられる。

そのため、次は FFT 処理をし、画像情報を周波数情報でとらえた後に Ridge 回帰を行い、再評価をした。まず、FFT 処理後の周波数情報を示した図をいかに示した。

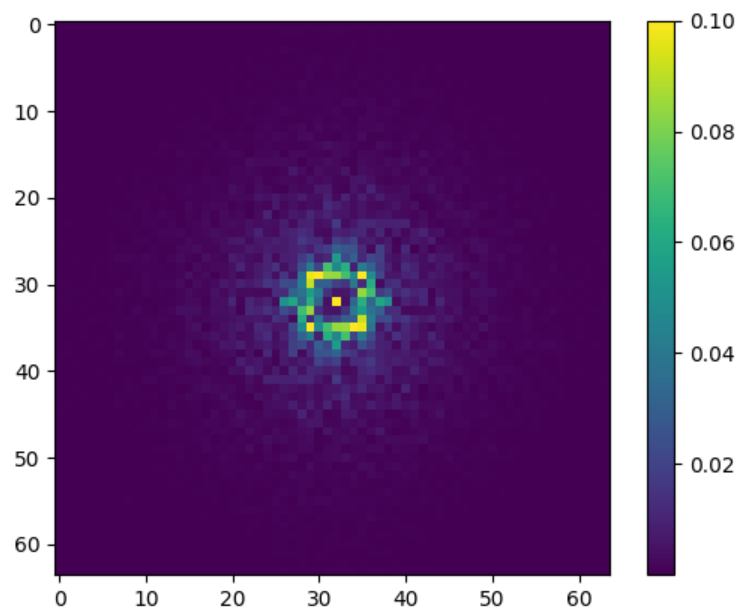


図 4.2.3 FFT 処理後の画像

この図より，中央部分が高周波であり，外側の部分が低周波であることが分かる。これは画像データから微細構造での構造の違いを捉えるのに適した特徴を正確にとらえることができていることが分かる。

この FFT による特徴量を用いて Ridge 回帰を適用した結果を以下の図に示した。

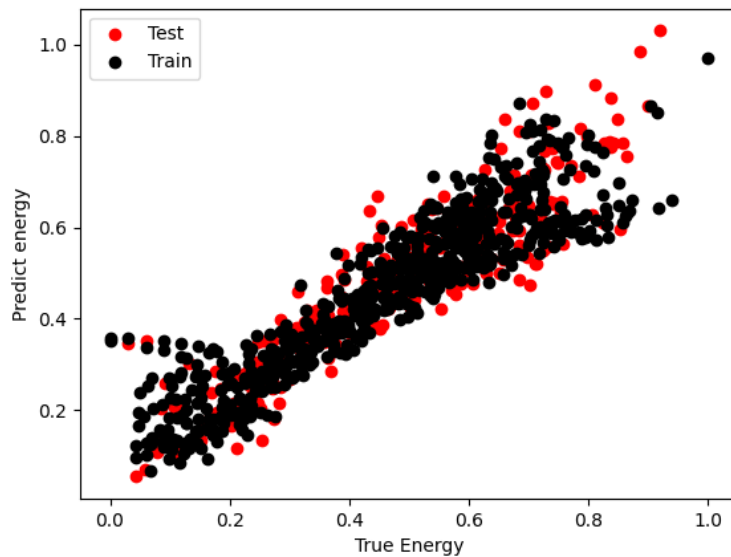


図 4.2.4 FFT 処理後の Ridge 回帰回帰モデルの予測結果(1)

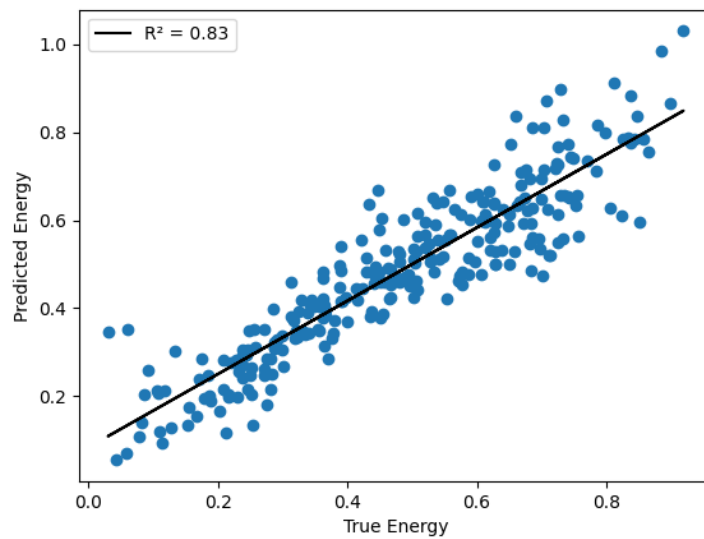


図 4.2.5 FFT 処理後の Ridge 回帰モデルの予測結果(2)

この図より、FFT 処理後の Ridge 回帰モデルの予測結果は、線形回帰モデルや FFT 処理をしていない Ridge 回帰モデルに比べて R^2 値が 0.83 と大幅に改善しており、データの信頼性も極めて高いことが分かる。エネルギーの値もほとんど直線状に分布しており、高い予測精度が分かる。FFT を実行した場合とそうでない場合の予測結果を比較すると FFT 処理を行うことによって R^2 値が大幅に改善した。これにより、微細構造の空間的情報がエネルギーの値と強い関係をもつことが分かる。元の画像データではノイズや必要では情報が多いため、それらに影響されてデータの精度が落ちていたが、FFT 処理を行うとそのような情報がなくなり、エネルギー値と関係のあるデータつまり構造の違いを捉えるのに適した特徴のみをとらえていたため、予測精度が大幅に向上したと考えられる。

最後に、画像から直接エネルギー値を予測できる CNN モデルを構築し、物性予測を行った。
まず、デフォルトモデルでの学習曲線と予測結果を以下の図に示した。

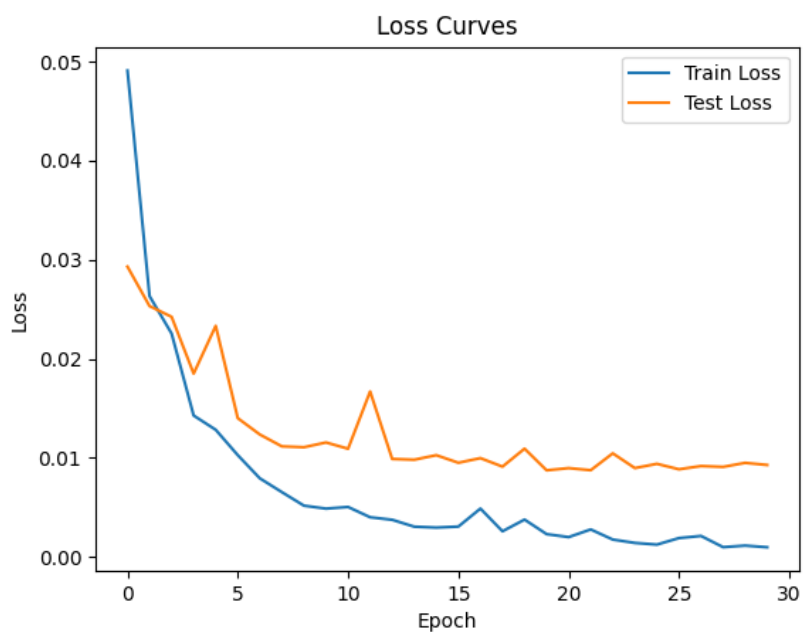


図 4.2.6 CNN のデフォルトモデルでの学習曲線(1)

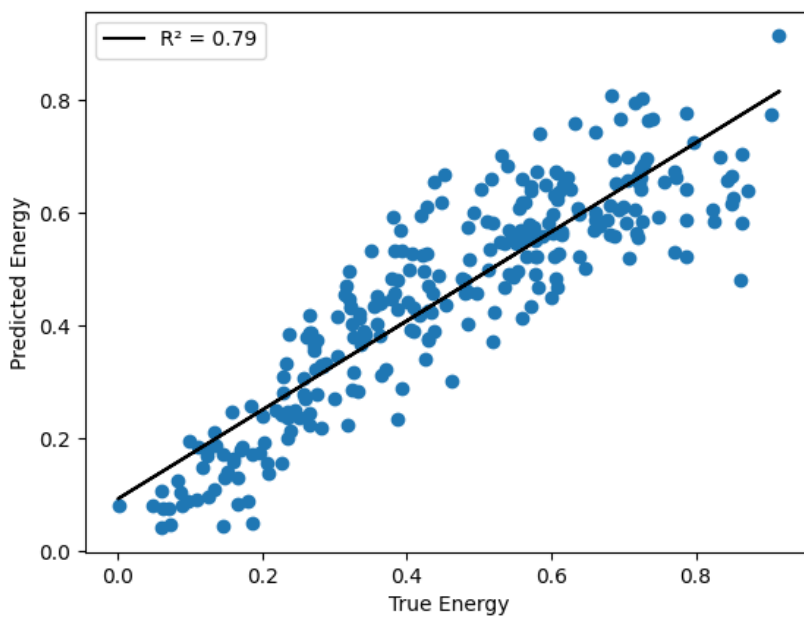


図 4.2.7 CNN のデフォルトモデルでの予測結果(2)

図 4.2.6 は CNN モデルでの学習過程を示すグラフであり、横軸は学習の進み具合を示し、縦軸は損失(予測と正解のずれの大きさ)を表している。このグラフより訓練とテストどちらでも学習が進むにつれて損失が減少しており、モデルが正確な予測をできるようになっていることを示している。テストでも訓練と同じような現象の仕方をしているということで未知のデータにもしっかり対応していることが分かる。

また、訓練とテストでの損失にそこまでの差がないため、そこまで過学習の強い兆候は見られないことが分かる。

図 4.2.7 より、CNN モデルの予測結果は R^2 値が 0.79 となっており、とても高い予測精度になっていることが分かる。しかし、予測結果の一部の点は直線から離れており、すべてが正確な予測ではないことが分かる。特にエネルギーが大きい領域ではばらつきが大きくなっていることが分かる。

次にハイパーパラメータ(学習率・重み減衰率)を変化させたときの学習曲線と予測結果を以下の図に示した。ここで、学習率とは学習量を調整するものであり、学習が進まない場合には増やし、発散する場合には減らすことができる。また、重み減衰率とは過学習を防ぐために正規化をし、モデルの複雑性を抑制する。

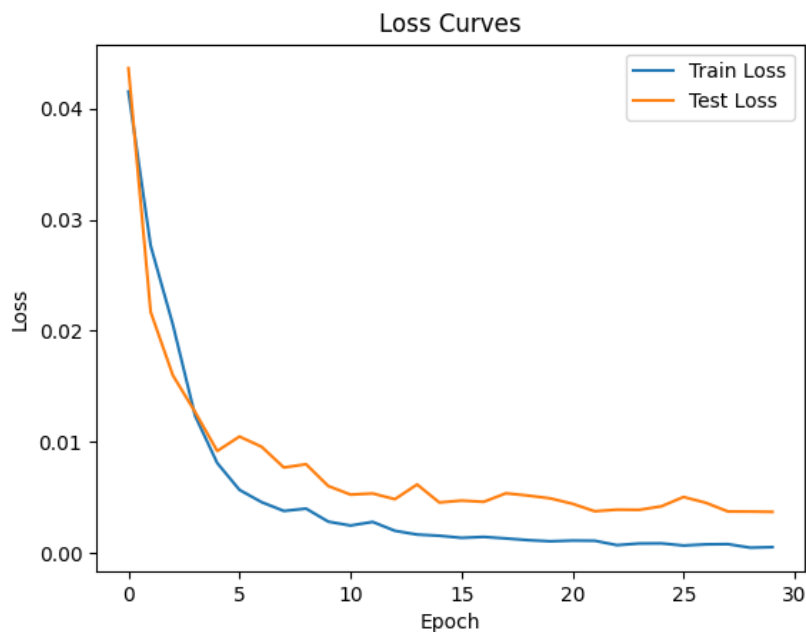


図 4.2.8 CNN のハイパーパラメータを変化させた時の予測結果(1)

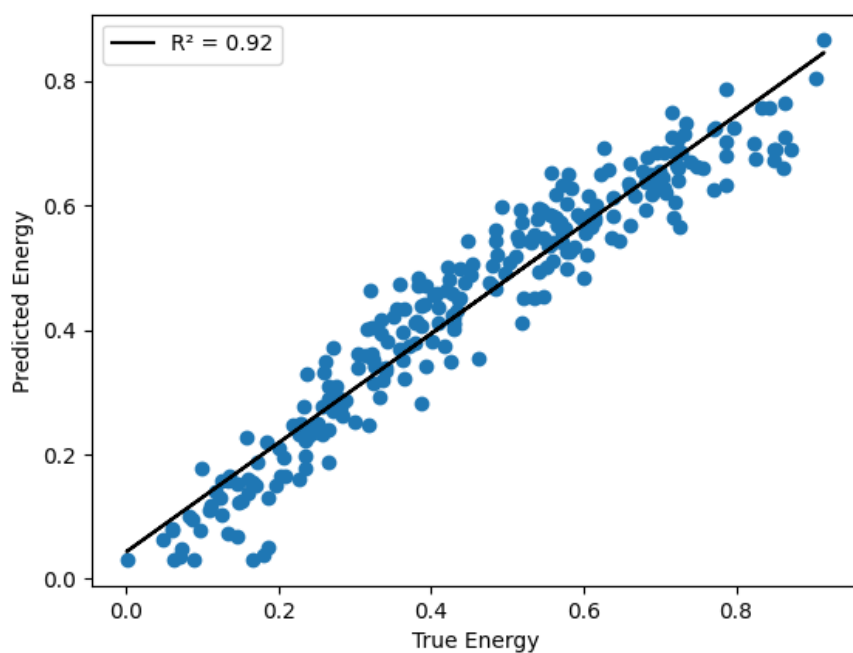


図 4.2.9 CNN のハイパーパラメータを変化させた時の予測結果(2)

図 4.2.8 より学習が進むにつれて損失が減少しており、モデルが正確な予測をできるようになっていることを示している。また、訓練とテストでの損失の差がデフォルトモデルに比べてさらに少なく、これはデフォルトモデルに対して学習率や重さ減衰率を変化させたことによって過学習が少なくなったことが原因だと考えられる。

図 4.2.9 より CNN モデルの予測結果は R^2 値が 0.92 を表しており、とても高い予測精度を持つことが分かる。また、予測結果の全ての点がほとんど直線上にあることも分かる。

デフォルトモデルでの CNN の学習曲線は訓練損失が順調に減少する一方でテスト損失との間に大きな乖離が生じており、最終的にテスト損失が高い水準で推移していることから、訓練データに過度に適合し、未知のデータに対する汎化能力が低下する過学習の状態に陥っていると判断できる。この過学習の兆候は、予測結果における決定係数 (R^2) が 0.79 と比較的低く、散布図の点も理想的な直線から離れて広く分布していることによって裏付けられている。一方、ハイパーパラメータを変化させたときの学習曲線は、訓練損失とテスト損失が共に低い値に収束し、両者の間に大きな乖離が見られないことから、過学習が効果的に抑制され、高い汎化性能が維持されていることが示唆される。この優れた学習挙動は、予測結果の決定係数 (R^2) が 0.92 と大幅に改善され、散布図の点が理想的な直線に密に集中していることから明らかであり、ハイパーパラメータを変化させたときの CNN モデルの予測精度がデフォルトモデルでの CNN の予測精度よりも格段に優れていることを示している。これらの違いは、CNN における畳み込み層と MaxPooling 層のハイパーパラメータの適切な調整に起因すると考えられます。畳み込み層は画像から特徴を抽出する役割を担い、そのフィルタ数、層の深さなどが学習する特徴の種類と複雑さに影響を与え、また MaxPooling 層は次元削減をもたらし、モデルの複雑性を軽減して過学習を抑制する効果も期待できるため、ハイパーパラメータを変化させたときの CNN モデルではこれらの層のハイパーパラメータなどの正則化手法が、データとタスクの特性に合わせて最適化されたことで、過学習を効果的に防ぎ、未知のデータに対するモデルの汎化能力と予測精度を大幅に向上させることができたと考えられる。⁽⁵⁾

Ridge 回帰と CNN の予測結果を比較し、それぞれの特徴と違いを考察する。

まず、Ridge 回帰についても一度確認すると、FFT 処理を行わない生データでの予測結果では R^2 値が -7.10 という極めて低い値を示し、全く予測に役立たないことが明らかになった一方で、データに FFT 処理をすることで周波数成分という有効な特徴量が抽出されると、 R^2 値が 0.83 に向上し、高い予測性能を発揮した。これは、Ridge 回帰のような線形モデルが効果的に機能するためには、問題に直結する適切な線形特徴量の前処理が極めて重要なことを示していることが考えられる。

次に CNN の予測結果を見ると、デフォルトモデルでは R^2 値が 0.79 と FFT 処理を行わない Ridge 回帰よりはるかに優れているものの、FFT 処理後の Ridge 回帰には及ばない中程度の性能を示した。しかし、ハイパーパラメータを適切に調整した CNN モデルでは R^2 値が 0.92 にまで向上し、最も高い予測精度を達成した。この結果は、CNN が手動での前処理なしに、畳み込み層を通じて入力データから自動的に特徴を学習する能に優れていることを示しており、さらに適切なハイパーパラメータ調整によってその潜在能力を最大限に引き出すことが分かる。

従って、この比較から Ridge 回帰は、データの本質が線形関係で表現できる場合や、有効な線形特徴量を抽出できる場合には、高い予測性能を実現できる強力なツールであることが示された。一方で、CNN は、生データから自動で複雑な非線形特徴を学習する能力に優れており、特に手動での前処理が困難な場合や、データが非常に複雑な非線形関係を持つ場合に、適切な調整を行うことで Ridge 回帰を上回る予測精度を持つことが分かる。どちらのモデルが最適かは、問題の性質、利用可能なデータ量、計算リソースといった様々な要因を考慮して判断されるべきであると考えられる。

5. 結論

今回の実験では金属組織の微細組織データに対して教師あり学習と教師なし学習を行い、解析を行った。線形回帰モデルと Ridge 回帰モデルと CNN の解析を通じてそれぞれの解析法の特徴をとらえ、特に CNN は画像データから物性値を高精度に予測できることが理解できた。

6. 参考文献

- (1)一杉太郎、進化するマテリアル・インフォマティクスマテリアル×機械学習×ロボット、株式会社東京化学同人、4~10、2024
- (2) 高木知弘 山中晃徳、フェーズフィールド法、養賢堂、P61~P67,2012 年
- (3)岩崎悠真、マテリアルズ・インフォマティクス材料開発のための機械学習超入門、日刊工業新聞、2~8、2019
- (4)木野日織 ダム ヒョウチ、Python ではじめるマテリアルズインフォマティクス、近代科学社 Digital,13~18,2022
- (5)船津公人・井上貴央・西川大貴、詳解マテリアルズインフォマティクス有機・無機化学のための深層学習、近代科学社 Digital、32~64、2021