

論文の内容の要旨

論文題目 深層学習を用いたプロセス・構造・特性連関の抽出と材料設計・プロセス最適化への展開

氏 名 野口 聖史

材料設計は、所望の特性を持つ材料を同定し、その構造やプロセスを明らかにする逆問題である（図1上部）。近年、従来の「膨大な実験」と「熟練者の経験や勘」に代わる材料設計・プロセス最適化の方法として、計算機を用いた効率的な手法に期待が高まっている。計算機を用いた材料設計・プロセス最適化を実現するために図1に示したプロセス・構造・特性連関の把握は中心的な課題であると認識されている。

プロセス・構造・特性連関の獲得を目指す一般的な方法論として、様々な時空間スケールの個々の計算モデルをボトムアップに統合するIntegrated Computational Materials Engineering (ICME) に代表されるモデル駆動型の手法と深層学習に代表されるデータ駆動型の手法が盛んに研究されている。これらの従来手法は基本的に入出力の

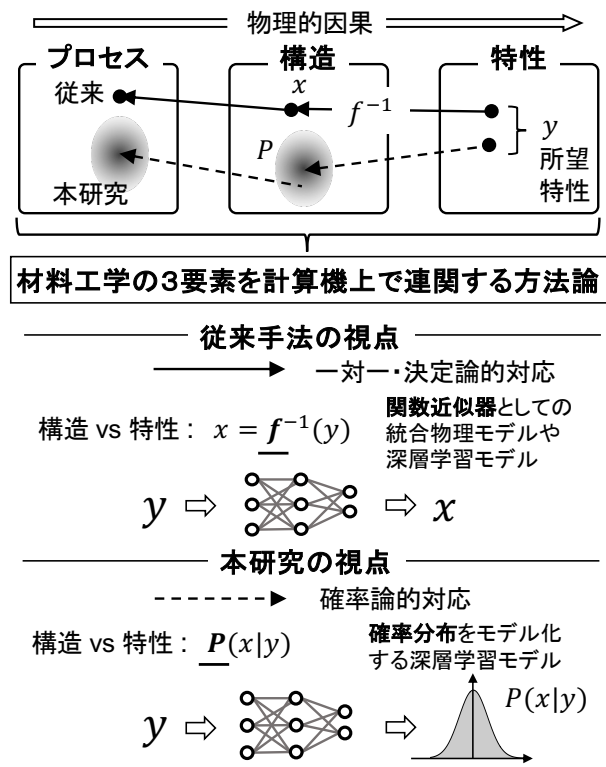


図1 材料設計の因果と本研究の視点

一対一対応関係を仮定した決定論的な手法である。

しかし、材料設計においてプロセス・構造・特性は必ずしも一対一対応しない。例えば、本研究の対象の一つである鉄鋼組織の場合、様々な時空間スケールを持った複数の物理現象の競合の結果として組織構造が決定するため、同一プロセスに対しても組織の粒子サイズや体積分率、個々の結晶粒の形状は一意に決定されず、確率的な分布として与えられる。その結果、材料組織に強く依存して決定される材料特性も確率的にしか決定されない。従って、プロセス・構造・特性の確率的連関を獲得することが構造材料設計の肝であり、確率的な現象理解に従った方法論構築が望まれる（図1 破線矢印）。また、組織生成に関与する現象が多様である鉄鋼材料などの場合、個々の現象への還元・それぞれの現象間の適切な連成の記述が困難であるため、ICMEのような現象の忠実なモデル化・連結を基礎とするボトムアップ的な手法によるプロセス・構造・特性連関の解析は極めて難しい。以上の背景から、計算機を用いて鉄鋼材料などの構造材料設計を達成する上で、データ駆動型の手法を用いて実現象から不確実性を含めてプロセス・構造・特性連関を抽出し得る方法論構築が不可欠である。

本研究は鉄鋼材料などの構造材料や医薬品分子を対象に、深層学習を用いてプロセス・構造・特性連関を、不確実性を含めて抽出・解析し得る枠組みを確立することを目的とする。特に、プロセス・構造・特性連関を材料構造に介在されたプロセスと特性の連関として解釈し、材料構造の確率的特徴付けを中心として、連関獲得のための枠組み構築を目指す。また、構築した枠組みの獲得する相関の物理的な意味や既知の物理的・材料的知見との親和性などの観点から、抽出したプロセス・構造・特性連関を基礎とした材料設計・プロセス最適化への展開を議論する。以下に各章ごとの主要な結果について示す。また、それぞれの章の主要な結果を簡単にまとめたものを図2に示す。

2章では、まず本研究の根幹を成す深層学習の枠組みを示す。材料構造の確率的特徴付けのための技術的課題とし、(i) 材料構造に埋め込まれた組織の確率的性質を特徴量として適切に抽出すること、(ii) 抽出した特徴量を用いて、組織構造に内在する確率的性質をできる限り保存する仮想構造サンプルを生成すること、の2点が指摘されている。本論文では、それぞれの課題を解決するためにVector Quantized Variational Autoencoder (VQVAE) とPixel Convolutional Neural Network (PixelCNN) と呼ばれる二つの深層学習モデルを用いる。VQVAEによって、材料組織からそれを表記する特徴量を抽出する。VQVAEによって抽出される特徴量は、入力した材料組織を構成するそれぞれ独立な幾何学構造の空間配列として解釈される。さらに、PixelCNNによって特徴量の空間配列に関する秩序を獲得する。同時に、PixelCNNはその空間配列とプロセスや特性といった所望のパラメータの相関を抽出する。本研究の与える枠組みの重要な特徴として、PixelCNNによって特徴量の空間配列を記述する確率密度関数を明示的にモデル化することがある。その確率密度関数からのサンプルとして、対象の組織構造に内在する確率的性質を保った仮想構造サンプルの生成が可能になる。つまり、プロセスや特性などの所望のパラメータと組織構造の確率的な相関の抽出が可能になる。加えて、本章では枠組みを検証するための例題として、連続冷却プロセスによって得られた低炭素鋼組織画像を用いて、プロセス・構造連関及び構造・特性連関の獲得を考察

した。特に、冷却速度と鉄鋼組織及び鉄鋼組織と強度・伸びの連関の獲得への枠組みの適用について議論した。その結果、特定の冷却速度から予測される鉄鋼組織は平均粒径や体積分率などの組織の基本的な幾何学的特徴に関して実験で観察される組織に定性的に一致した。加えて、予測される組織と実験で得られた組織それぞれの平均粒径とフェライト相の体積分率を計算・比較した結果、それらは平均的な挙動に加えて確率的なばらつきも含めて十分な精度で一致した。また、強度及び伸びから推定された鉄鋼組織に関しても、体積分率や粒径などの基本的な幾何構造に関して実験で得られる組織と定性的に一致することが確認された。これらの結果は、本研究で構築した枠組みが、順問題・逆問題問わずに、不確実性を含めてプロセス・構造連関及び構造・特性連関の獲得し得ることを示している。

3章では、本研究の枠組みが、明示的な物理的メカニズムなどの問題固有の情報を直接導入することなく、材料的・物理的に説明可能な知識を獲得できるかを検討する。特に、強度と破断伸びに関する人工二相鋼組織の構造最適化問題の文脈で、破断伸びに支配的な影響を与える部分構造を同定する問題を考察する。一般に、深層学習の獲得する知識の解釈は困難であり、深層学習で獲得した相関の一般化への障壁となる。特に、材料設計などで重要となるデータの存在しない領域への外挿を考えるためには、深層学習が獲得する連関の材料的意味に対する議論は不可欠である。そのため、深層学習モデルの獲得する知識の解釈のための第一歩として、深層学習モデルの獲得する相関の微分を計算することで、破断歪みに対する二相鋼組織の感度解析を行い、その結果を物理モデルの与える破断現象に支配的な影響を与える部分構造と定性的に比較した。その結果、本枠組みが予測する破断伸びに支配的な影響を与える部分構造は、物理モデルの与える破断現象への支配的影響部と十分な精度一致することを確認した。この結果は、本研究の与える枠組みが物理的に説明可能な知識を抽出することを示す一つの根拠である。同時に、深層学習の獲得する非自明な知識の解釈に関する一つの方法論を提供する。

4章では、データ不足を補う一つの方法として、分野に蓄積された知識を深層学習モデルに適切に取り込むことができるかについて議論する。深層学習を材料分野へ応用する上での一つ課題として、材料分野で蓄積され訓練データとして使用できるデータの量が、手法そのものが議論される情報分野よりも著しく少ないことがある。従って、高い精度を達成するためには、データの不足を補うための材料分野固有の議論が不可欠である。そのための一つの方策として、本章では、Johanson-Mehl-Avrami-Kolmogorow式と本枠組みを融合することで、組成と熱処理条件から鉄鋼組織画像の推定を試みた。その結果、未知組織の推定に関して、物理モデルの導入によって、物理モデルを導入しない場合と比較して組織推定精度が向上することを確認した。この結果は、データ量の限られる材料分野への深層学習の適用において、既知の知見と本枠組みの融合がデータ不足を補う一つの方法として有効であることを示しており、深層学習と物理モデルの連結によって分野に蓄積された知見を取り込む一つの雛形を与える。

5章では、他分野への展開として、本研究の枠組みを医薬品分子の構造最適化問題へ適用した。具体的には、特定の部分構造を有する構造のうち、ある性能に関する最適分子を探索する文脈で、従来手法（RNN: Recurrent Neural Network）と本研究の枠組

みの一部であるPixelCNNを比較した。本研究では、分子構造データとして分子構造を一次元の文字列によって表記するSimplified Molecular Input Line Entry System (SMILES)を用いた。RNNは、文字列に距離に対して単調減衰する相関を暗に導入し、PixelCNNは周期的な相関を暗に導入する。この文字間相関の違いが、構造探索に対してどのような影響を与えるかを主に検討した。その結果、PixelCNN（本研究）は探索開始分子に依らずロバストに探索可能である点で、従来手法より優位であった。さらに、探索可能領域に関しても従来手法より広く、より高性能な分子を含んでいることが確認された。特に、従来手法は、複雑な環状構造を含む実現が困難な分子を与えることがあるが、本研究の与える分子構造は局所的に閉じた単純な構造を有しており実現性の観点で有利であった。以上の結果は、分子構造最適化問題における、従来手法と比較した本手法の優位性を示すものである。

6章では、各章で与えた議論を材料の一般的視点から総括した。

7章では、本論文の結論を述べる。本論文では、材料構造の特徴づけを中心としてプロセス・構造・特性連関の獲得及び材料設計・プロセス最適化への展開を様々な文脈で検討した。上述の結果は、本研究の枠組み、材料設計、特にプロセス・構造・特性連関獲得のための有効な手立てとなることを明確に示している。

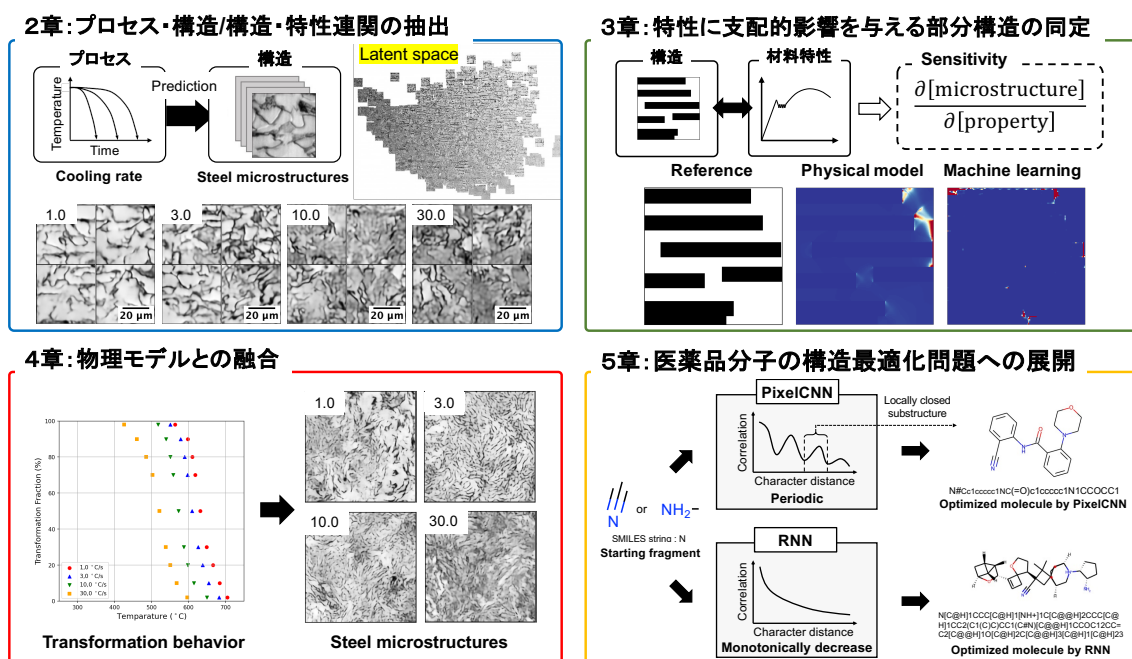


図2 各章の主要な結果の概要