

AI 画像解析結果を説明変数に用いた インフォマティクスによる粒子製造の最適条件の探索

窪内 将隆*, 西本 拓磨, 土屋 直紀, 松本 恭成

Exploring Optimal Conditions for Particle Production through Informatics Using AI Image Analysis Results

Masataka Kubouchi*, Takuma Nishimoto, Naoki Tsuchiya and Yasunari Matsumoto

Received 5 November 2024; Accepted 7 March 2025

In the manufacturing industry, there is a growing focus on the application of AI-driven material informatics (MI) and process informatics (PI). However, issues remain in the handling of information that is difficult to convert into data, particularly with regard to image data. While images contain critical information related to material performance, conventional methods have difficulty in accurately analysis. To address these issues, this paper introduces AI technology capable of quantifying images and presents examples that immediately quantify parameters related to particle size, shape, and color. Furthermore, we report on the optimization of manufacturing conditions through the utilization of this quantifiable image information, a capability that was previously unattainable.

Keywords: Informatics, Image analysis, Particle size classification, Bayesian optimization.

1. 緒 言

近年、製造業界では AI で新物質を発見するマテリアルインフォマティクス（以下、MI）や、製造工程を改良するプロセスインフォマティクス（以下、PI）の報告[1–3]が増えてきている。

MI とは、機械学習などの情報科学（インフォマティクス）を用いて、有機材料、無機材料、金属材料などさまざまな材料開発の効率を高める取組である。これまで材料開発の過程は、研究者の経験や知識、スキルに頼っていた。求められる条件を満たす材料を開発するため、何度も研究と実験を繰り返す必要があり、ときには一つの材料開発に数十年の期間を要することもある。研究開発を効率化し、新素材などを他社に先駆けて市場投入することは素材開発会社にとって非常に重要な課題である。PI とは、蓄積された製造データや実験データ、シミュレーションデータに情報科学を活用して、製造設備や制御条件などの製造プロセスの最適化・改善を行うことである。製造プロセスでは大規模になるほど最適化のための変数が増え、より複雑になってくる。商品の入れ替わ

りも激しく、新商品の製造が急がれる中、そのための製造プロセスを一刻も早く開発しなければならない。属人的な対応には限界があり、経営・現場それぞれにいち早い PI の導入が求められている。

こうした MI や PI に対する期待の高まりに対し、解決すべき課題はいくつか残っており、特にデータ化しにくい情報の扱いが挙げられる。画像は、そのままの状態では説明変数として活用することはできないデータである。しかし、ものづくりや製造業界では撮影してモノの良し悪しを判断することも多く、電池材料における焼結体の空隙率や、触媒における担持物の凝集率など、画像には性能に直結する重要な説明変数が含まれている。Fig. 1 に古典的な画像解析手法（二値化、エッジ検出）の例を示す。金属や酸化物表面の研磨痕の残留や、明るさの高低がある画像に対し、古典的手法（2）：二値化、（3）：エッジ検出で粒界を認識しているが、認識した緑色の領域は、正しくないことがわかる。そのため、これまで MI や PI に画像情報を用いるためには、（4）のように人の手で画像を測量するしか方法がなく、膨大な労力がかかっていた。このような課題は粉体に関しても同様である。粉体を取り扱う企業にとって、粒子径分布や凝集度や混合率は重要なにもかかわらず、定量的に測定することは困難だった。たとえば、粒子径分布を算出する方法として、粒子径分布測定装置、静的・動的画像解析法が挙げられる。しかし、これらの手法は光学的な手法であるため、ナノサイズや凝集粒子の 1 次粒子径や、細長い粒

株式会社 KNiT
〒541-0054 大阪市中央区南本町 2-1-1 本町サザンビル
TD フloor 1F)
KNiT Inc.
(TD Floor 1F, Honmachi Southern Building, 2-1-1 Minami-Honmachi,
Chuo-ku, Osaka 541-0054, Japan)

* Corresponding Author knit-inc@knit-itech.co.jp

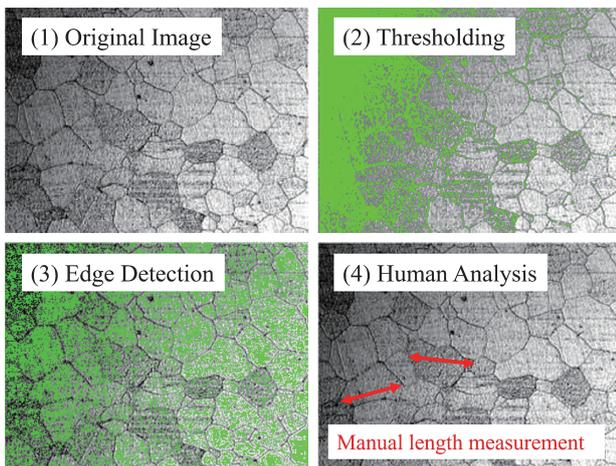


Fig. 1 Conventional image analysis methods [(2) Binarization, (3) Edge detection]

子に対して誤差が大きいという課題があった。またナノサイズの測定が可能な手法として動的散光法があるが、幅広い粒子径分布のサンプルには適しておらず、 $3\ \mu\text{m}$ 以上の粒子は測定できなかった。

そこで本報告では、「精度よく、誰でも簡単に、安価に」画像を数値化できるAI技術を報告する。本技術は、SEMやTEM、マイクロスコプや光学顕微鏡などで撮影された画像から直接測定するため、幅広い粒子径分布への対応が可能である。また静的・動的画像解析法のような古典的な画像解析手法ではなく、Deep Learningにより精緻な輪郭抽出を可能としているため、凝集粒子などのサンプルも精度よく解析することができる。また本技術を用いたAI画像解析サービス「GeXeL（ジクセル）」では、システムに画像をアップロードするだけで、AIが全自動で解析を行うため、AIや画像解析の知識がなくとも誰でも簡単に利用できる。このAIを用いることで、粒子径、アスペクト比、輝度平均値といった、大きさ/形/色に関するパラメーターが即座に数値化される。粒子径分布測定装置や従来のAIソフトが数百万円する一方で、GeXeLはイニシャルコストがかからず5万円/月から利用可能であり、導入コストも低い。本報告ではGeXeLによる画像解析の仕組みや精度を示したのち、数値化された画像情報を取り込んだPIの事例を報告する。

2. 実験方法

本報告では、ある企業のデータを用いて、粒径を大きくするとともに、粒径の均一性を高める製造条件を探索した。つまり、最大長（粒子の周囲座標における最大となるユークリッド距離）を大きくしつつ、その変動係数（標準偏差を平均値で除した値、以下CV）を10%以下にする多目的最適化を行った。本報告における解析は、次の2ステップに分けることができる。(1)画像解析ステップ、(2)条件最適化ステップである。(1)画像解析ステップでは、画像中の粒子認識を行う。(2)条件最適化ステップでは、最大長を大きくするとともにCVを小さくする

製造条件をベイズ最適化により探索する。

(1)画像解析ステップに関して、AIを用いた画像解析には「異常検知」、「物体検出」、「セグメンテーション」などが存在する。それらのすべてのタスクにおいて汎用的に必要なのは、画像の特徴量を抽出するニューラルネットワーク構造（以下CNN：Convolutional neural network）である。この部分はバックボーンと呼ばれ、代表的にはResNet[4]、Inception[5]、Vision Transformer（以下、ViT）[6]などが挙げられる。ResNet50は、当時最先端のCNNバックボーンであり、Inceptionと比較すると、計算コストが少し高い一方で、精度が高くなるケースが多い。ViTはXRや自然言語処理などに用いられ、大規模データセットでは精度が高くなる一方、本研究のような学習データが限られている場合では精度が上がらない。本研究では、画像の特徴量を抽出するバックボーンとしてResNet50を用い、ダウンロードしたままのResNet50では、粒子画像は未学習で精度が出ないため、ファインチューニングによりAIモデルを作成した（株式会社KNiT、GeXeL、AIナンバー：STD-00011）。また粒子認識には、正常と異常を判断する「異常検知」、物体の種類や数を判断する「物体検出」、境界や輪郭を認識する「セグメンテーション」がある。本検討では、画像を数値化する必要があるため、上記3手法で唯一数値化可能なセグメンテーションを用いた。セグメンテーションを行う代表的なアーキテクチャとして、R-CNN[7]やFast R-CNN[8]、Faster R-CNN[9]、Mask RCNN[10]、YOLO[11]などが挙げられる。またセグメンテーションには、セマンティックセグメンテーション、インスタンスセグメンテーション、パノプティックセグメンテーションがあるが、セマンティックセグメンテーションとパノプティックセグメンテーションは背景を認識するため本件には適さない。そのため、本研究で対象とするセグメンテーションおよびアーキテクチャは、個々の対象物をそれぞれ区別できる手法であるインスタンスセグメンテーションと、精緻な輪郭抽出が可能なアーキテクチャであるMaskRCNNを用いた。

また(2)条件最適化ステップでは、説明変数を原料種類、組成、混合条件、焼成条件、フラックス種、粉碎条件などの実験データとし、目的変数を画像解析から得られた最大長とCVとした。異なる実験条件で得られたデータ数は $N=20$ である。1枚の画像には200~300個の粒子が写っており、信頼区間95%に入るサンプル数は約600個であることから、おのおの実験条件ごとに対応する画像を3枚撮影し、平均値を算出することで最大長とCVを抽出した。本件の説明変数は30次元以上のデータのため、最大長やCVによって重要ではない説明変数が含まれている。通常、さまざまな説明変数から有効な変数を絞り込むことは、実験担当者の経験や知識に基づく属人的な作業となる。一方で、L1正則化（以下、Lasso：least absolute shrinkage and selection operator）による変数の絞り込み（以下、次元圧縮）は、正則化項により重要でない変数の削除が可能となる。また次元圧縮す

ることで、過学習を抑える効果もあり、次元圧縮は解析精度を高めるために有効な手法である。次元圧縮の結果として、重要変数として5つの説明変数(X1~X5:企業データのためマスク化)に注目した。これらX1~X5と目的変数に対し、Lassoおよびランダムフォレストで重要変数の予測を行った(本報告では、ベイズ最適化による条件探索を「探索」、Lassoやランダムフォレストによるモデルから数値を推論する場合を「予測」と記載する)。データは7:3で訓練データとテストデータに分割し、Leave-One-Out法で交差検証を行った。その後、ベイズ最適化により、目的を達成する条件を探索した。ベイズ最適化は、ガウス過程回帰に基づく統計的な手法で、重要変数の分布や分散から最適値を探索する手法である。獲得関数によっては、改良される実験条件を常に提示するのではなく、探索と改良を繰り返すことで最適な条件を絞り込むことができる。ガウス過程回帰モデルのカーネルにはガウシアンカーネルを用い、獲得関数ごとに検証を行った。

3. 実験結果および考察

3.1 画像解析ステップ

本技術の最大の特徴は、ImageJなどの古典的な手法では難しかった、重なり、ぼやけ、低コントラストの画像にも対応していることである。Fig. 2に本技術を用いた画像解析システムGeXeLによる解析例を示す。GeXeLでは明るさの差やノイズが多少あっても、人が領域を認識できる程度の画像であれば解析することができる。さらに、組成差による粒の微少な白黒コントラストを認識し、緑と青の領域のように組成差を分類することも可能である。AIの原理として、画像中に境界や輪郭を有する領域があれば解析を行うことができるため、化成品や食品や医療、ヘルスケア分野にも適用できる。また分類機能を使うことで、焼結体の空隙のみの認識や、異常品のみの粒子径分布、中空かどうかの判定など、多種多様な課題に対応することができる。

Fig. 3とTable 1に、本検討で解析した粒子画像およびGeXeLが出力できる幾何パラメータを示す。色が塗られている部分が認識された領域である。対象物1つ1つに番号が記載されており、これがIDとなっている。各IDに幾何パラメータが出力される。具体的な幾何パラ

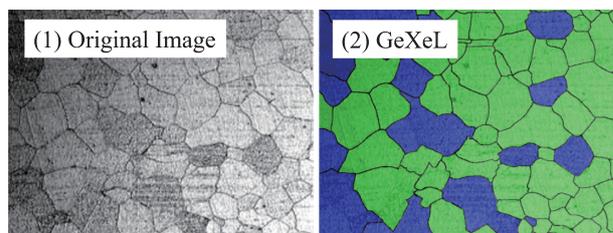


Fig. 2 Example of GeXeL analysis

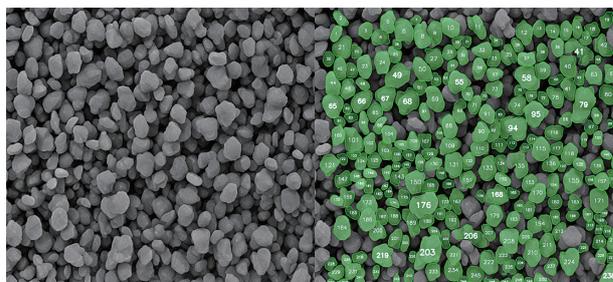


Fig. 3 One of particle images analyzed in this study

メーターには、一例として面積、円相当径、最大長、対角幅、アスペクト比、円形度、角度、対象物間距離、Gray ScaleやHSVなどの画素値が挙げられ、数/大きさ/形/色を数値化することができる。また統計情報も出力され、各幾何パラメータの平均、標準偏差、パーセンタイル、最大最小、変動係数なども出力される。また画像の面積比率、凝集率、配向性、混合度など、画像から見出されるさまざまなパラメータが出力可能である。

本報告では、最大長とCVをGeXeLにより抽出した。精度は画像のpx数、ぼやけの程度、対象物の大きさなどに依存するが、px数は600×600px以上、解像度は300dpi以上、1画像に対する対象物数が50~2000個であることが望ましい。結果を見ると、色が塗られていない箇所や、ID41のように誤認識している箇所も見受けられるが、人が手動で二値化した統計量と比較して誤差は3%以内だった。

3.2 条件最適化ステップ

画像解析の結果と、製造データを統合し、Lassoとランダムフォレストで重要変数の要因解析を行った。Fig.

Table 1 Geometric parameters output by GeXeL

	Heywood [μm]	Max. Length [μm]	Diagonal Width [μm]	Aspect Ratio	Roundness	Closest Distance [μm]
Average	31.13	39.64	28.71	1.42	0.75	34.19
SD	9.08	11.96	8.81	0.30	0.08	6.58
Min.	13.72	17.24	12.02	1.00	0.43	19.72
D10	20.66	24.87	18.99	1.08	0.65	26.28
D50	29.90	38.58	27.87	1.37	0.77	33.68
D90	43.80	55.53	41.43	1.84	0.83	42.83
Max.	59.54	85.59	61.52	2.47	0.88	52.61
CV	29.16	30.16	30.68	21.01	10.13	19.24

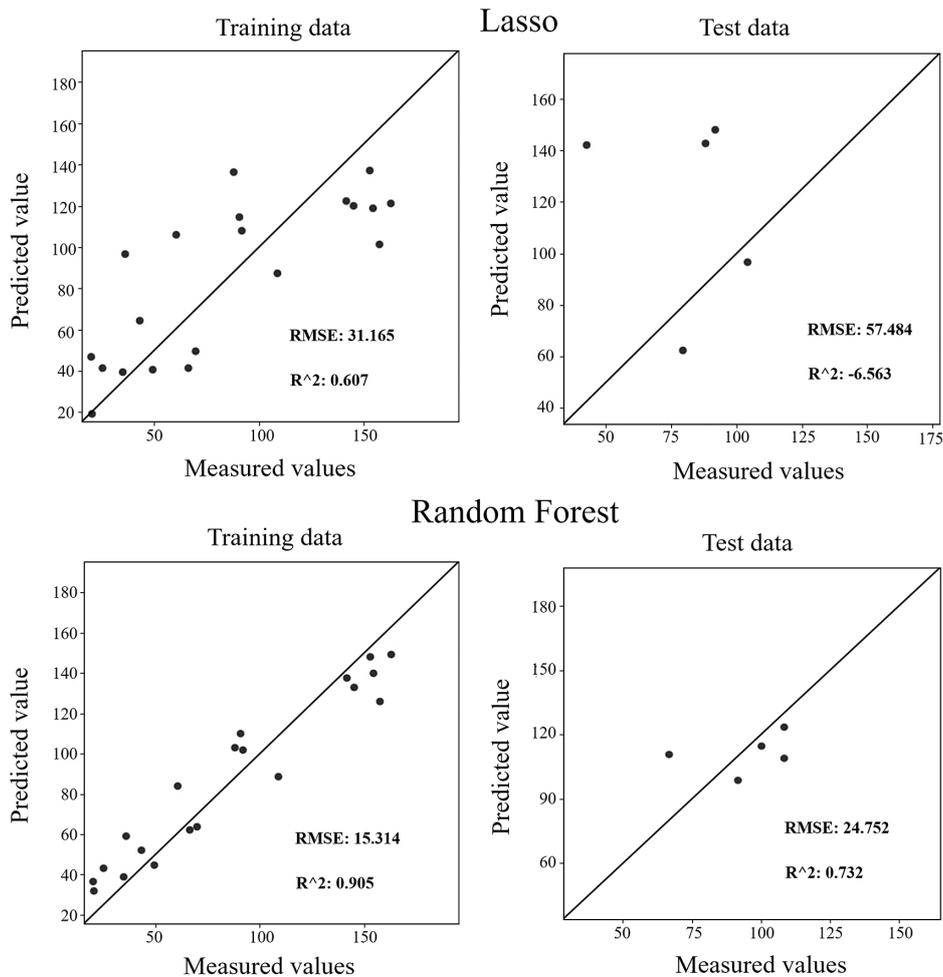


Fig. 4 Results of Lasso and Random Forest training and test data

4にLassoとランダムフォレストの訓練データとテストデータの結果を示す。Lassoのテストデータでは平均平方2乗誤差（以下、RMSEという）が57.484、決定係数（以下、 R^2 という）は-6.563であったが、ランダムフォレストではRMSEが24.752、 R^2 は0.732だった。RMSEと R^2 は以下の数式で表される。

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2} \quad (1)$$

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2} \quad (2)$$

上記において、 n はデータ点の数、 y_i は実際の値、 \hat{y}_i はモデルが予測した値、 \bar{y} は実際の値の平均を表している。RMSEとは、予測値と実測値の差の大きさを示す指標で、RMSEが低いほどモデルの精度がよいことを表している。 R^2 は回帰モデルがどの程度データの分散を説明できているかを示す指標で、モデルの予測精度を示し、1に近いほどよいモデルである。 R^2 は実測値と予測値が大きく外れる場合には、分子の値が大きくなり負の値を取ることもある。Lassoでは R^2 は負の値を取り、うまく予測でき

ていないことから、ランダムフォレストの方が予測精度が高く、 R^2 が0.7以上の場合予測精度が十分だといえるため、重要変数はランダムフォレストの結果を参考とした。

Fig. 5にランダムフォレストの重要変数の結果を示す。説明変数のうち、最大長に関してはX3が支配的な要因であった。そのため、最大長を制御するためには、おもにX3に注目して制御すればいいことがわかった。CVに関しては、X4がもっとも重要であり、X1、X2、X3、X5の順番だった。最大長と異なり、1つの説明変数が出出して重要ではないため、CVを最適化するためには、複数の製造条件の最適化が必要だということがわかった。

最後に、最大長がより大きく、かつCVが10%以下となる条件をベイズ最適化で探索した。なお、1回の探索回数が多いとより優れた条件が得られる可能性がある一方で、実験条件のメッシュ値（たとえば温度を1°Cおきに探索するのか、10°Cおきに探索するのか）、獲得関数の種類、重要変数の重みなどハイパーパラメーターが多く、これらの掛け算により指数関数的に探索時間が増加するため、探索の上限回数は5回とした。また予測値にはガウス過程回帰の結果を反映することで、繰り返しの改善予測を行っている。獲得関数には期待改善量（以下

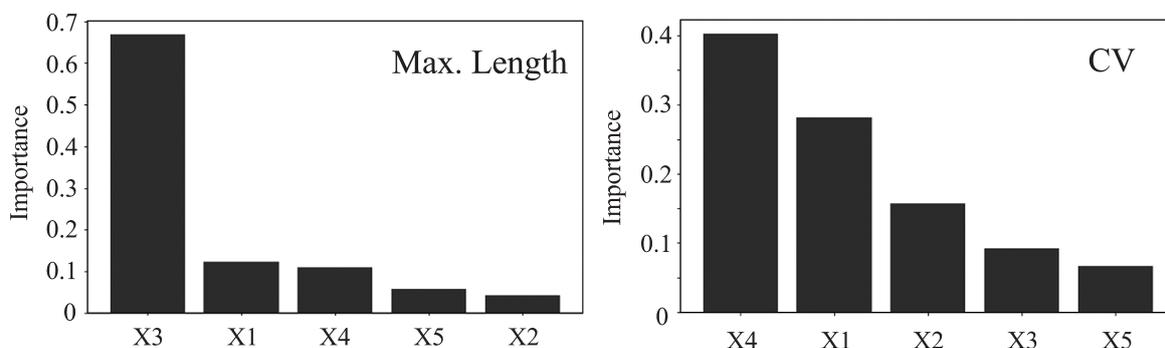


Fig. 5 Random Forest importance results

Table 2 Improvement process by Bayesian optimization

	X1	X2	X3	X4	X5	Max. Length [μm]	CV [%]
Improvement 1	71.3	220	62.4	9.52	68.2	144.9	11.4
Improvement 2	71.9	267	73.0	9.91	68.0	152.6	20.2
Improvement 3	68.0	467	66.5	2.32	0.1	154.4	29.3
Improvement 4	75.1	318	55.1	3.97	42.2	157.4	10.6
Improvement 5	57.9	260	67.5	7.81	65.2	162.9	8.8

EI : Expected Improvement) と、制限付き信頼境界 (以下 LCB : Lower Confidence Bound) を用いた。EI は現在の最良解を改善する可能性が高い場所を探索し、LCB は不確実性の高い領域を探索する。つまり、EI では現在最適な条件付近を重点的に探索する (局所解に陥る) 傾向があり、未知の条件の探索は確率的に行いにくい。そのため、あまり実験が行われていない範囲において最適条件を見つけることを苦手とする傾向がある。一方で LCB は、ポテンシャルを有しているものの現時点で不確実な条件に対して探索する傾向があるため、現状の最適条件にトラップされる可能性が低く、実験空間を網羅的に探索することが可能である。ただし、探索に注力することで、最適値までたどり着くのに時間がかかるデメリットを有する。結果として、獲得関数が EI のときは、最大長と CV のいずれも局所的な実験条件にトラップされたため、目標を達成する条件は見つからなかった。そこで、獲得関数を LCB とした場合、5 回目の探索で、もっとも最大長が大きく、CV が 10% 以下となる条件が得られた。これは、探索範囲が局所にトラップされず、幅広い条件

を検討できたためだと考えられる。Table 2 にベイズ最適化の改善過程を示す。LCB における 3 回目の探索では、X5 が極端に低い値となっていることから、LCB によって探索が行われていることがわかる。今後は、実際にこの実験条件でサンプルを作製することで、予測された結果が得られるかどうかを検証する。

4. 結 言

本報告では、画像解析と、条件最適化という 2 種類の AI を用いて、粒子を改良する製造条件を探索した。粒子径を最大化しつつ、CV を 10% 以下にする条件を探索したところ、5 回目の探索で、目的を達成する条件が得られた。

今後、製造業の自動化が進むにつれ、本報告のような画像を数値化したのちに、インフォマティクスを用いて製造工程を最適化する手法は必須になると考えられる。人口の減少やノウハウの属人化が深刻化していく上で、製造工程をデータ化し、客観的に条件を最適化していく手法が必要になると考えられる。

References

- [1] A. Agrawala, A. Choudhary, Materials informatics and big data: Realization of the “fourth paradigm” of science in materials science, *APL Mater.* 4 (2016) 053208.
- [2] L. E. Vivanco-Benavides, C. L. Martínez-González, C. Mercado-Zúñiga, C. Torres-Torres, *Comput. Mater. Sci.* 201 (2022) 110939.
- [3] W. Xia, Z. Hou, J. Tang, J. Li, W. Chaikittisilp, Y. Kim, K. Muraoka, H. Zhang, J. He, B. Han, Y. Yamauchi, Materials informatics-guided superior electrocatalyst: A case of pyrolysis-free single-atom coordinated with N-graphene nanomesh, *Nano Energy* 94 (2022) 106868.
- [4] K. He, X. Zhang, S. Ren, J. Sun, Deep residual learning for image recognition, *Proc. 2016 Conference on Computer Vision and Pattern Recognition* (2016) pp. 770–778.
- [5] C. Szegedy, V. Vanhoucke, S. Ioffe, J. Shlens, Z. Wojna, Rethinking the inception architecture for computer vision. *Proc. 2016 Conference on Computer Vision and Pattern Recognition* (2016) pp. 2818–2826.
- [6] A. Dosovitskiy, L. Beyer, A. Kolesnikov, D. Weissenborn, X. Zhai, T. Unterthiner, M. Dehghani, M. Minderer, G. Heigold, S. Gelly, J. Uszkoreit, N. Houlsby, An image is worth 16x16 words: Transformers for image recognition at scale, *Proc. 2021 International Conference on Learning Representations* (2021) pp. 1–22.

- [7] R. Girshick, J. Donahue, T. Darrell, J. Malik, Rich feature hierarchies for accurate object detection and semantic segmentation, Proc. 2014 Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (2014) pp. 580–587.
- [8] R. Girshick, Fast R-CNN, Proc. 2015 International Conference on Computer Vision (2015) pp. 1440–1448.
- [9] S. Ren, K. He, R. Girshick, J. Sun, Faster R-CNN: Towards real-time object detection with region proposal networks, IEEE Trans. Pattern Anal. Mach. Intell. 39 (2017) 1137–1149.
- [10] K. He, G. Gkioxari, P. Dollár, R. Girshick, Mask R-CNN, Proc. 2017 International Conference on Computer Vision (2017) pp. 2961–2969.
- [11] J. Redmon, S. Divvala, R. Girshick, A. Farhadi, You only look once: Unified, real-time object detection, Proc. 2016 Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (2016) pp. 779–788.