

# 画像MI技術を用いた物性予測手法の開発

大阪大学大学院基礎工学研究科CSRN 小口 多美夫  
ダイキン工業株式会社 化学事業部 松本 博士、橋本 光平

目的) ダイキン工業ではMaterials Informatics (MI)の導入を推進しているが、MIの学習データに適した画像データが不足している現場もあるため、本研究では学習データ不足を解決するため、高精度な疑似画像を生成できる敵対的生成ネットワーク (GAN) を用いた物性予測モデルの開発を行う。

内容) フッ素化合物の画像データ (SEM等) に対してGANを適用し、注目している物性に関する情報を包含する疑似画像を生成し、これを物性予測モデルに適用し、疑似画像の有効性を検証した。

結果) 今年度はデモ画像を用いてGANが稼働し、高精度な疑似画像が生成できることを確認した。

利用した計算機	SQUID GPUノード群
ノード時間	4,000 時間
並列化	1~8ノード 並列

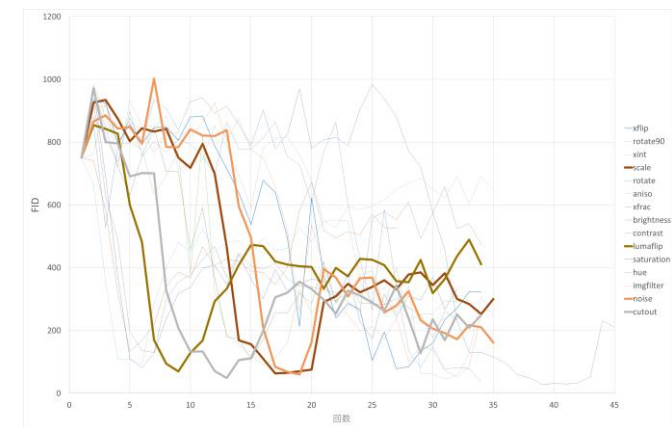


図 512×512 pixel画像、8GPUでの計算結果の一例。  
scale、noise、lumaflip、cutoutはデモ画像に対して有効なデータ補強手法であることが分かった。