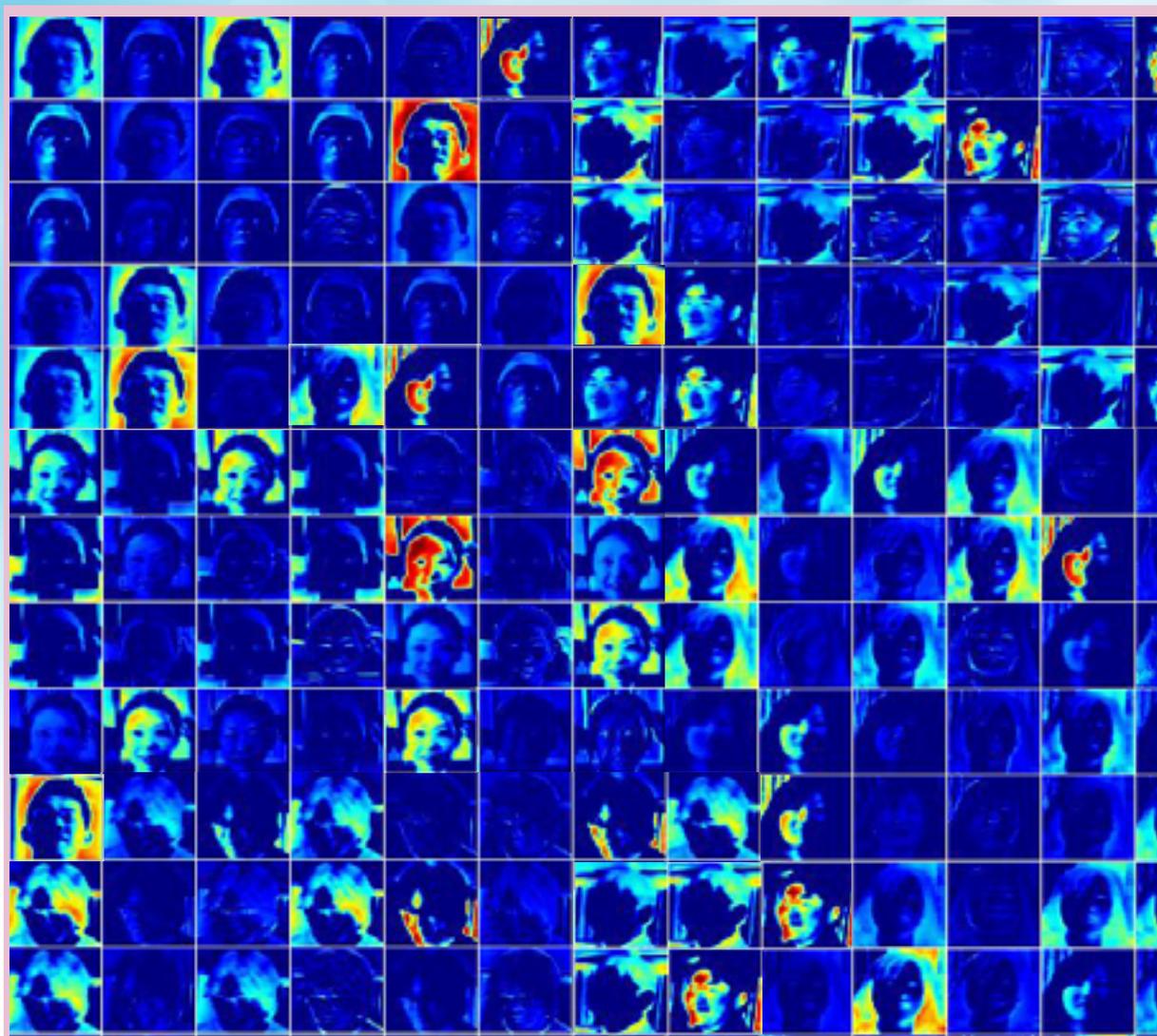


計算材料学センターだより 特集号

2017年3月



顔認識ディープニューラルネットの畳み込み層1層目の出力（複数の結果を合成しています。）
これらの画像は特徴マップと呼ばれ、入力画像中の顔の輪郭や目や鼻、陰影などのパターンを検出している様子が確認できます。

Contents

- ・【特集】ディープラーニングはじめました
- ・セミナーシリーズ「計算科学で識る半導体エピタキシャル成長」
- ・ユーザーの声
- ・新人職員あいさつ
- ・異動職員あいさつ、人事異動
- ・編集後記

CCMS
NEWS
Special

ディープラーニングはじめました

はじめに

近年では様々な分野で学術研究機関や企業を問わず、新しいものの開発や実験結果の検証にシミュレーションおよび情報工学的手法を用いることが当たり前となっています。そして、計算機性能の向上によってディープラーニングという新しい手法が実用化しつつあります。これまでは人間が計算機に一つ一つ命令を出してきましたが、ディープラーニングを用いることで計算機が結果を判断したり推論を行うことができるため、研究開発分野でのディープラーニングの利用が強く推進されています。材料分野においても、新材料の探索手法の一つにマテリアルズ・インフォマティクスという実験・シミュレーションから得られた大量のデータから情報工学的手法を用いて必要な知識を取り出すデータマイニング技法がありますが、これにディープラーニングを用いることで新材料の開発設計の高速化が期待されています。材料分野に限らず様々な分野でこのような技法が利用されており、今後ますます計算機やシミュレーション、情報工学的手法の利用が加速していくでしょう。

ディープラーニングの使用方法・性能調査

計算材料学センターでは、ディープラーニングで画像の学習を行い、使いやすさや性能などを調べてみました。ディープラーニング自体の説明は、世の中に優れた書籍や論文、Web サイトが多数ありますので、そちらに頼るとして、この記事では、フレームワークやアプリケーションの充実によってディープラーニングを簡単に利用できるということを試行したので、紹介したいと思います。

ディープラーニングの特徴と扱える問題

深層学習（ディープラーニング）は、多層のニューラルネットワークを用いた機械学習の方法論です。近年、音声や画像、言語などを対象とする問題で、他の方法を圧倒する高い性能を示し、研究者や技術者の注目を集めています [1]。

ディープラーニングの特徴をまとめると下記ようになります。

・ロバスト性

特徴量の設計を行う必要がない。特徴量は自動的に獲得される学習用データのばらつきの影響を抑えながら自動的に学習していく。

・一般性

同じニューラルネットワークのアプローチを多くの異なるアプリケーションやデータに適用することができる。

・スケーラブル

ニューラルネットワークは原理的に並列動作するため、並列コンピューティングにより、パフォーマンスが向上しやすい。

ディープラーニングで解ける問題は大まかに、「画像に写っているのが猫か犬かを推論する」ような分類問題と「A社の1ヶ月後の株価を予想する」など連続の出力を持つ関数に近似させるような回帰問題です。

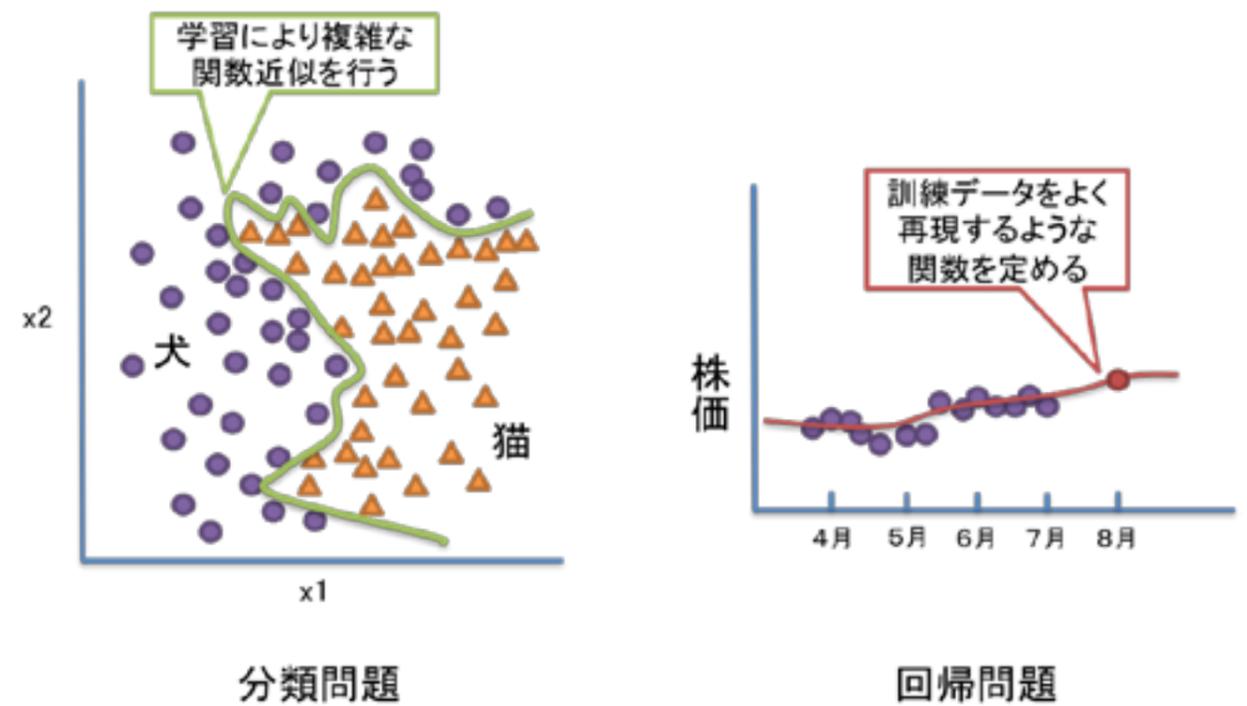


図1：分類問題、回帰問題の例

DIGITS を用いた計算材料学センター職員の顔認識

Deep Learning のフレームワーク「Caffe」[2] を、NVIDIA 社の DIGITS[3] を使って、学習用データのセットアップ、ネットワークの学習、そして推論を行うというディープラーニングの一連の動作を試行しました。DIGITS では Web ブラウザからデータセットの作成やニューラルネットワークの作成、GPU を含めた計算ジョブの投入などの一連の操作を行うことができるフレームワークです。

顔認識用データの用意

写真を撮り、入力サイズ (256x256) に合わせて切り抜いて、それぞれの顔の画像データを作成します。タグ付けのファイルを作成して、DIGITS から読み込みます。一人当たり 30 ~ 40 枚、全部で 180 枚程度の画像データを用意しました。



図 2：顔認識学習に用いたデータセットの一部

ニューラルネットワークモデルと学習

DIGITS から学習に使うニューラルネットワークを作成し、学習データやすべてのデータを一通り学習する回数 (epoch)、学習係数などのパラメータを指定して学習を開始します。使用したニューラルネットワークは AlexNet[4]、epoch 数は 100 として、計算には GPU (TESLA K20 を 2 枚) を使用し、5 分程度で学習が終了しました。学習が進むとエラー率が低下し、正解率が上がっていくことが確認できます。今回のデータでは学習終了時点 (100 epoch) で 85% 程度の正解率となっていました。また、トレーニングデータに対する誤差 loss (train) は、正解率と相反して減少しており、トレーニングデータに対して精度よく分類できるようになっていることがわかります。学習状態の検証用データに対する誤差 loss (val) は、loss (train) ほどではないが、学習が進むにつれて減少しており、トレーニングデータ以外でもうまく分類できるようになっていることがわかります。ここで loss (train) が減少しているのに loss (val) が上昇していくような場合は、トレーニングデータは正解するが、未知のデータをうまく扱えない過学習と呼ばれる状態に陥っています。

推論と結果

それでは、本当に学習したネットワークが計算材料学センターの職員を識別できるかどうか確かめるために、学習には使用していない未知のデータを入力して顔を判別できるかを試します。1 人あたり 5 枚の画像を新たに用意し、それぞれの画像を入力して識別した結果を表 1 に示します。

表 1 から igarashi, kadowaki, yamada はすべてのデータで識別が成功していました。sato, otaki のデータでは失敗となるものが 1 つありました。otaki の検出に失敗したデータは、学習データにもあまり含まれていない眼鏡を外している写真であったため、うまく認識できなかったものと考えられます。このような場合も、学習データを増やすことで回避することが可能であると考えられ、5 名ほどの顔認識問題であれば、簡単に解決することができました。

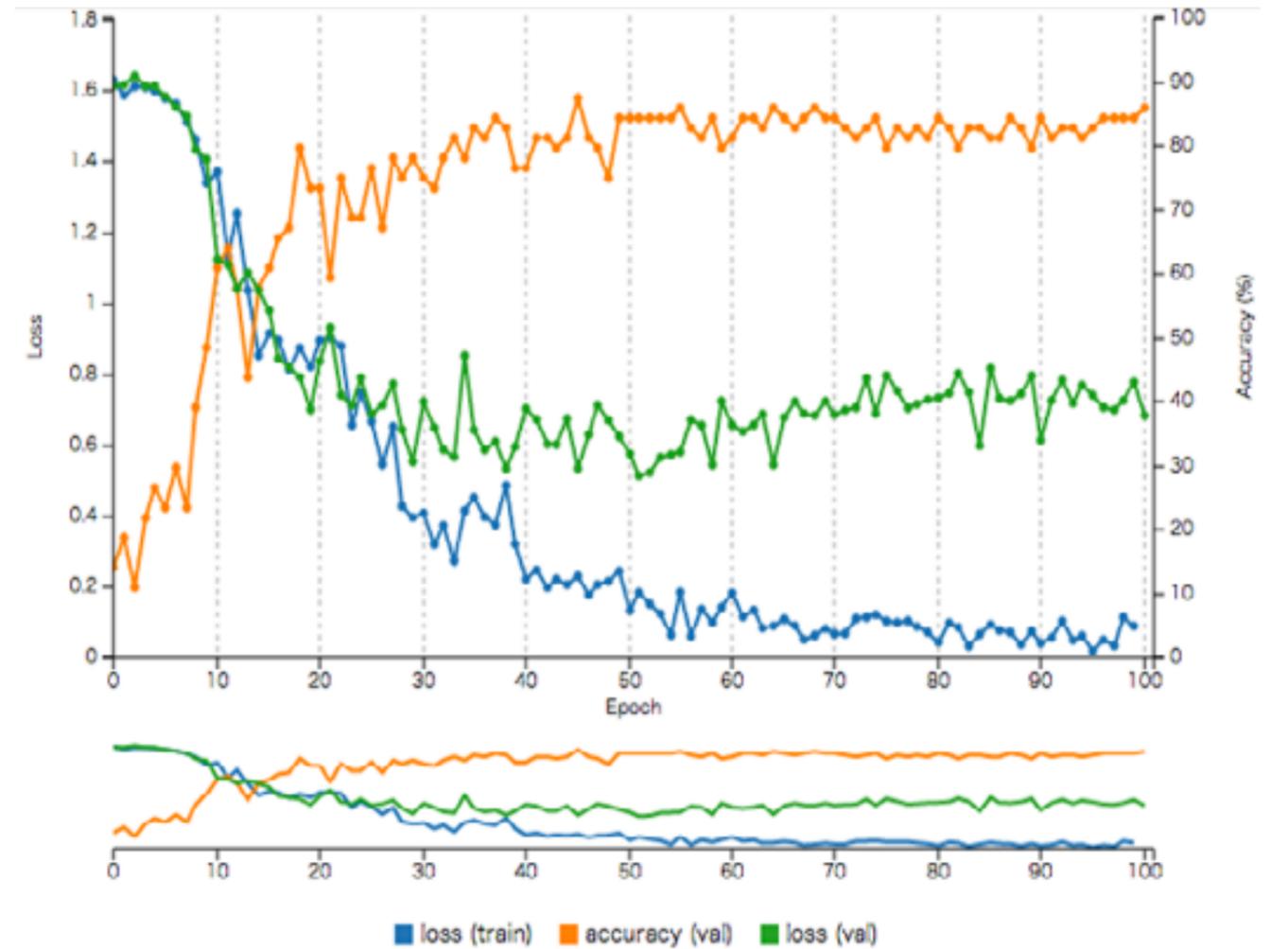


図 3：学習 (100 epoch) における正解率と誤差率

表 1：未知データ推論の結果

	sato	igarashi	otaki	kadowaki	yamada
test01	○	○	○	○	○
test02	○	○	○	○	○
test03	○	○	○	○	○
test04	○	○	×	○	○
test05	×	○	○	○	○



Predictions

sato	99.94%
igarashi	0.06%
yamada	0.0%
otaki	0.0%
kadowaki	0.0%

Predictions

igarashi	99.92%
sato	0.08%
yamada	0.0%
kadowaki	0.0%
otaki	0.0%

Predictions

otaki	99.97%
yamada	0.03%
sato	0.0%
igarashi	0.0%
kadowaki	0.0%

Predictions

kadowaki	93.74%
yamada	3.74%
sato	2.53%
otaki	0.0%
igarashi	0.0%

Predictions

yamada	99.78%
kadowaki	0.21%
sato	0.02%
otaki	0.0%
igarashi	0.0%

図4：推論の結果の一部



Predictions

yamada	58.24%
otaki	35.87%
sato	2.77%
igarashi	2.73%
kadowaki	0.56%



Predictions

kadowaki	73.28%
sato	11.16%
otaki	8.98%
igarashi	6.53%
yamada	0.05%

図5：推論に失敗した場合

DIGITS を用いた画像中の自動車検出

顔認識はディープラーニングの分類問題でしたが、回帰問題の例として、NVIDIA DIGITS のチュートリアルに KITTI データセット [5] を用いた物体検出問題があるのでこれを試してみました。顔認識との違いは、顔認識では画像そのものが誰であるかというのを分類していましたが、物体検出では画像中のどこに検出すべき物体があるかを認識します。物体検出問題は、これまでアルゴリズムによるアプローチが主流でしたが、ディープラーニングの登場により 10%以上精度が向上したと言われています。

ディープラーニング画像を入力層のニューロン数のサイズ (例えば 256x256) でスライドさせながら読み込んで行き、そこに検出する物体があるかどうかをクラス分けします。学習用のデータセットの作成や画像の読み込み方などの難しさがあります。

データの用意

KITTI の Web ページからダウンロードできる学習用データ (train)6373 個と教師データ (validation)1108 個を使用します。



図6：自動車検出に用いたデータセットの一部

ニューラルネットワークモデルと学習

ネットワーク構造はNVIDIAから提供されている detectnet[6]を使用しました。githubで公開されています[7]。この計算では、顔認識と同様GPUを使用し、学習が終わるまでに2日と8時間かかりました。ネットワークが複雑になり、データ数が多くなると計算時間も長くなります。

未入力データを使った検出

金研の近くで道路の写真を撮影し、その画像を用いて車検出を試しました。検出したい画像を入力して結果が出るまでに1枚あたり10秒から20秒程度かかりました。

図8の検出結果を見ると、自動車の前(b)や横(a)、斜め(c)からの画像でもよく検出できています。また、柵で一部が隠れて(a)いたり、植え込みの向こう(c)にある自動車も検出できているため、様々な状態に対応した柔軟性のある検出ネットワークになっていると考えられます。アルゴリズムでは実現することが困難な条件を含めて人間が直接検出すべき特徴量を設計することなく、学習するだけで検出できるようになることがディープラーニングの最大の強みだと言えます。

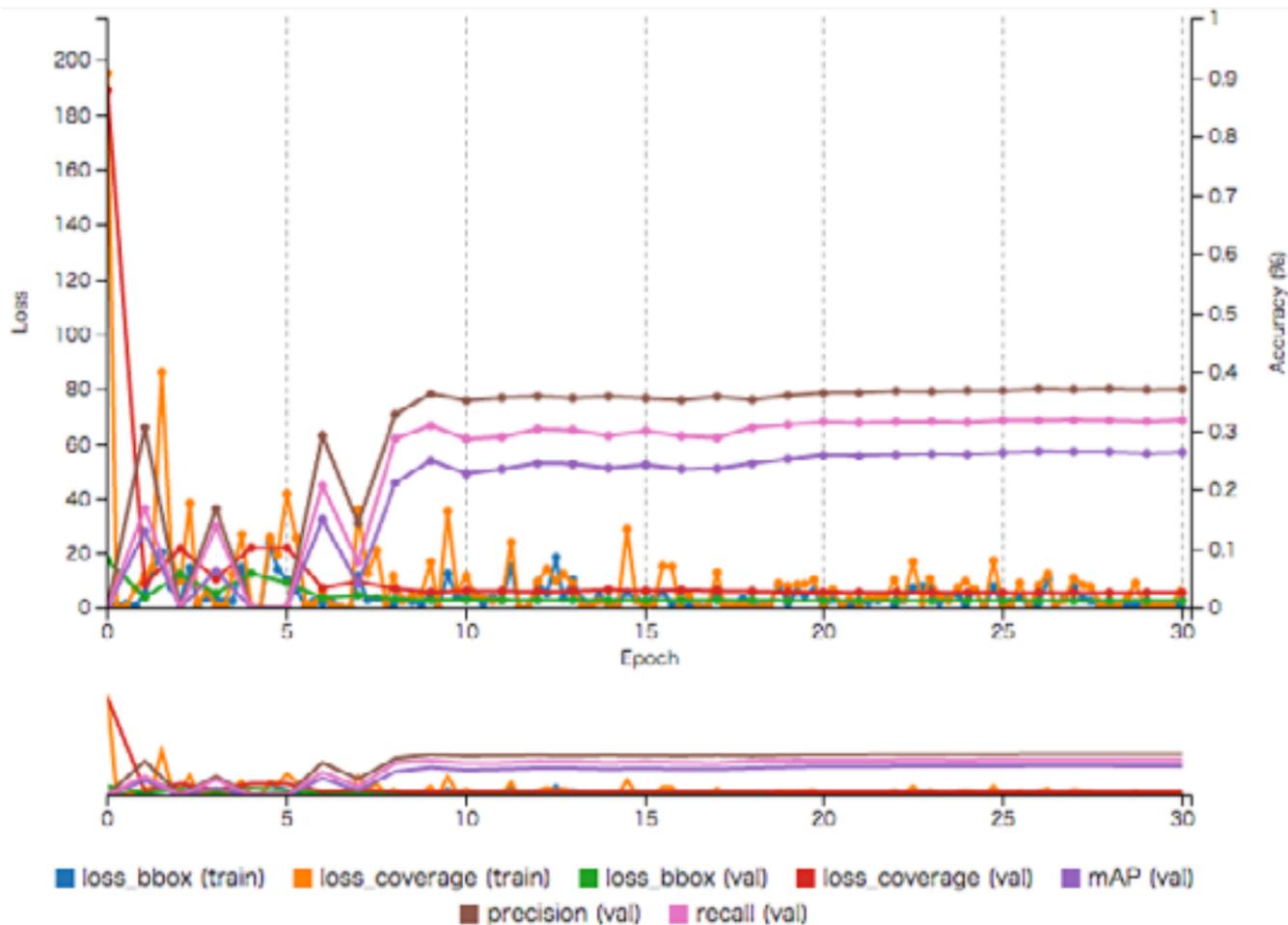
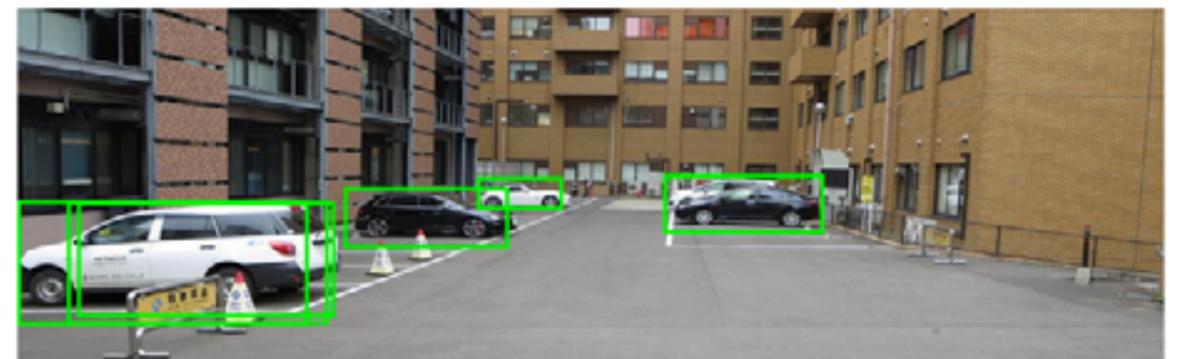


図7：自動車検出の学習における誤差率など

Source image



Inference visualization



(a)

Source image



Inference visualization



(b)

おわりに

ディープラーニングによる画像の分類と物体検出を試しました。DIGITS では Web ブラウザから簡単にディープラーニングのジョブを生成することができることを確認しました。また、膨大な計算を要するのは学習過程であり、学習済のネットワークで問題を解くときにはあまり計算量は多くありません。そのため、学習済のネットワーク構造を出力する機能などもあり、高速な計算機と DIGITS であらかじめ学習を行い、そのネットワークを組み込み機器などに実装することを想定した機能もありました。

今回は、材料に関するデータではありませんでしたが、物体検出は、電子顕微鏡の画像から検出したい構造などを学習させて、装置等に組み込み機器と学習済のネットワークを導入しておけば、自動的にその構造を検出するなどの応用の可能性があると考えます。また、画像ではなくエネルギーや数値計算ソフトなどの抽象的なデータを用いた学習や遺伝的アルゴリズムなどの情報工学的手法の調査にも取り組んでいきたいと思えます。

計算材料学センターでは、ディープラーニングの計算環境の構築をお手伝いします。ご興味・ご関心のある方はお気軽にお問い合わせください。

計算材料学センター 丹野航太

Source image



Inference visualization



(c)

参考文献

- [1] 岡谷貴之, " 深層学習 ", 講談社, 2015
- [2] Caffe: Deep learning framework, "<http://caffe.berkeleyvision.org/>"
- [3] DIGITS, NVIDIA Developer, "<https://developer.nvidia.com/digits>"
- [4] Alex Krizhevsky, Ilya Sutskever, and Geoffrey E. Hinton, "ImageNet Classification with Deep Convolutional Neural Networks", NIPS2012: 1106-1114. 2012
- [5] The KITTI Vision Benchmark Suite web site, A project of Karlsruhe Institute of Technology and Toyota Technological Institute at Cicago "<http://www.cvlibs.net/datasets/kitti/>"
- [6] DetectNet: Deep Neural Network for Object Detection in DIGITS, "<https://devblogs.nvidia.com/parallelforall/detectnet-deep-neural-network-object-detection-digits/>"
- [7] BVLC, "https://github.com/BVLC/caffe/tree/rc3/models/bvlc_googlenet"



図 8 : 未知データにおける自動車検出結果

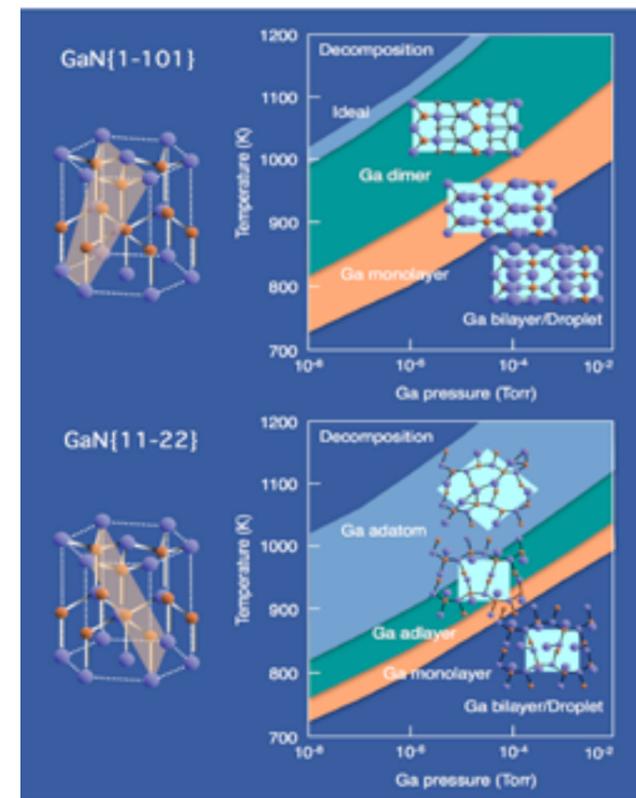


「計算科学で識る 半導体エピタキシャル成長」

三重大学大学院工学研究科 伊藤智徳

昨年の12月21日(水)に計算材料学センターのスパコンプロフェッショナル第4回として、「計算科学で識る半導体エピタキシャル成長」という題目で話をさせていただきました。「IT」という言葉も今は昔、最近では「IoT」という言葉が一般的になり、インターネットを介した様々なモノのデータ利用が、産業、社会構造の変革をもたらすと考えられています。そのIoT普及の鍵を握るのが半導体分野の技術革新であり、MBE、MOVPEを始めとするエピタキシャル成長は、その基盤として重要な役割を果たしています。

講演では、私が1980年代初めに計算材料科学に足を踏み入れた経緯から話を始めました。当時と比較すると、高速、大容量計算機と市販ソフトウェアが利用可能、インフォマティクスに代表される計算機が生産(?)するデータ活用に大きな注目が集まる今日の状況は、いわば産業革命前後の家内制手工業と工場制機械工業の如き違いを感じます(もっとも家内制手工業好きの私は、計算材料科学の本来の強みは、現象の物理解明にあると思っていますが...)。このような観点から講演の前半では、実験との接点を意識した成長条件(温度、気相圧力)を考慮した量子論に基づく、エピタキシャル成長「場」としての表面構造状態図作成(データ生産)、後半ではその「場」での成長過程予測、さらにマクロ理論を併用した成長様式の検討等、エピタキシャル成長における「わかっているようで、わかっていない」こと(現象の物理解明)に向けたアプローチの一端を紹介しました。



質疑では、方法論に関する質問を主にいただきました。私の専門が、機械工学、結晶成長実験、計算材料科学へと変遷したこともあり、的確にお答えすることができず申し訳なく感じました。ちょうど方法論を開発した15年ほど前に、とある研究会で結晶成長理論の専門家の方々と長時間にわたり議論、やっとのことで理解いただいたことを思い起こし、進歩のなさを痛感しています(年齢的に無理と言いつつ...)。今回講演依頼をいただいた毛利先生とは、1990年前後に混晶半導体平衡状態図の共同研究で一緒にしており、思わぬ形で旧交を温めることができました。また金研の宇田先生、松岡先生からは有益なご指摘をいただきました。この場をお借りしてお礼申し上げつつ、本稿のまとめとさせていただきます。



スパコンプロフェッショナルは今後も月一回程度の開催を目指し、実施を計画しておりますので是非お越し下さい。これまでのセミナーの概要と開催予定は下記のセンターのWebサイトから確認いただけます。

●計算材料学センター セミナーシリーズ「スパコンプロフェッショナル」アーカイブス

<http://www-lab.imr.tohoku.ac.jp/~ccms/Jpn/seminar/index.html>



ユーザーの声



センターをご利用いただいているユーザーの方々に、ご意見・ご感想等を伺いました。今回は、計算材料学研究部門（久保研究室）のユーザーよりご意見をいただくことができましたので、その中の一部を掲載いたします。また、各ご意見についてセンターからひとこと付けさせていただきました。

Q 1 スパコンシステムを利用する上で問題点はありますか？

A 1・・・ジョブの待ち時間が長い。

センターから・・・電気料金の値上げに対応する苦肉の策として 2016 年は 60% の部分稼働を行っており、ユーザーの皆様には大変ご迷惑をおかけしております。稼働しているノード数が少ないため、ジョブの待ち時間が長い傾向にあります。2017 年度は予算についての見通しが立ったため、稼働ノード数を増やす予定でおります。

Q 2 他機関のスパコンセンターと比べて、計算材料学センターが利用しにくい点がありますか？

A 2・・・Linux の OS ではないので、使いにくい。

センターから・・・本所スパコンの CPU は IBM の POWER7 であり、その性能を最大限に発揮させるために OS も IBM の AIX となっております。利用できるコマンドやオプション等が Linux の OS とは異なるため、一部の GNU コマンドを /opt/freeware/bin にインストールしており、パスを設定することにより利用可能です。ご不明な点がございましたら、当センターへお問い合わせください。

Q 3 他機関のスパコンセンターと比べて、計算材料学センターを利用して良い点がありますか？

A 3・・・スパコンの使い方などに関するトラブルの対応が早くて親切である。

センターから・・・ありがとうございます。我々は、センターの技術職員としてユーザーの皆様からの様々な問い合わせに対応しております。特に多い問い合わせに関しては、センターの Web ページの FAQ に掲載しておりますので、是非ご覧ください。

大変貴重なご意見をいただき、ありがとうございました。このようなユーザーの声を元に、センターのサービス向上に努めてまいります。また、計算材料学センターにご意見等ございましたら、お気軽にご連絡ください。

新人職員あいさつ

技術補佐員 山田 麻美

昨年 5 月より、技術補佐員としてお世話になっております。スパコン利用成果報告書の編集や、セミナーの広報準備などを担当しています。

私生活では、2 歳の息子と旦那さんとの 3 人家族です。これと言った趣味などはないのですが、最近の一番の楽しみはやっぱり息子！たくさん食べ、うたをうたったり、おどったり、走る・とぶ・転ぶ、泣く・・・日々成長している彼を見ているのが何よりの活力です。

まだこどもが小さいこともあり、看病などで続けてお休みを頂いたりセンターの方々には迷惑を掛けておりますが、精一杯お仕事をしていきたいと思っております。

センター以外の皆様とは、お目に掛かる機会はあまり無いかと思いますが、今後ともどうぞよろしくお願ひします。

異動職員あいさつ

事務補佐員 門脇 希

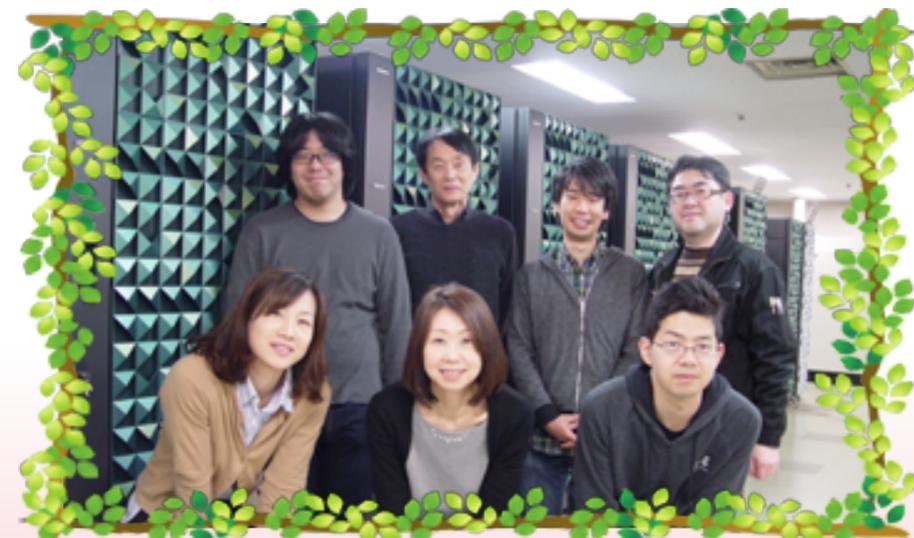
計算材料学センターの一員として金研のスパコンを所内の皆さんに知って欲しいという気持ちで一年を過ごしました。金研北門に入って右手の一見普通の棟ですが、中ではスパコン 10 基が、震災後電気代高騰の影響を受け 6 割稼働に甘んじながら、真の実力を再び発揮することを夢見て日々熱を発しております。せっかくなのでその熱でお湯を沸かしたい！という野望がありましたが、実現には至らず残念です。

平成 30 年度新システムへ更新予定ですので、皆様の目に触れる機会も多くなると思います。沢山の方向に利用していただけるよう、陰ながら応援しております。

人事異動

定年退職 センター長 毛利哲夫

配置換え 事務補佐員 門脇 希



編集後記

少しずつ春の気配がして、花粉症まっただ中。企画、編集して冊子を発行するという経験は初めてでしたので、発行にたどり着けてほっとしています。

計算材料学センターではスパコンの活用例を知って頂く取り組みとして、9月よりセミナーシリーズ「スパコンプロフェッショナル」を月1回開催しています。これは昨年はじめに実施した所内へのアンケート結果から、計算材料学センターの認知度の低さやスパコンに対する心理的バリアの改善を目指してのことでした。そして今回の特集号は、多くの所内のみなさまの手にとってもらい、センターの活動やスパコンを更に身近に感じて頂きたいという想いを込めて企画・編集しました。また、センター職員の“顔”がみえる事を意識しました（冒頭の特集記事では実際にはほぼ全員の顔が出ていますね）。スパコンはもちろんセンターや職員について「あれ？これまで思ってたのとイメージが違うな・・・」なんて感じて下されば幸いです。次回特集号の発行は未定ですが、また興味を持って読んで頂けるような記事を企画できたらと思っています。

最後に、4年に渡り熱いご指導と励ましで我々センター職員を牽引し、また自らもセンター運営に奔走してくださったセンター長・毛利哲夫教授と、笑顔と細かい気配りで日々の業務を支えて頂いた事務補佐員の門脇希さんに心より感謝申し上げます。（山田麻美）



企画・編集

計算材料学センター職員

佐藤和弘 五十嵐伸昭 大滝大河 丹野航太 門脇希 山田麻美

計算材料学センターだより 特集号

2017年3月28日 発行

東北大学金属材料研究所 計算材料学センター
〒980-8577 仙台市青葉区片平二丁目1番1号
電話 (022) 215-2411 FAX (022) 215-2166

URL <http://www-lab.imr.tohoku.ac.jp/~ccms/>
E-mail ccms-adm@imr.tohoku.ac.jp

