

OLED 照明向け有機膜の蒸着における分散板・膜厚分布データセットの構築と 画像変換サロゲートモデルの性能評価*

山口優太 **,† 三浦孝章† 西山正志 **

Construction of a Diffuser-Plate and Thickness-Distribution Dataset
and Performance Evaluation of an Image-to-Image Translation Surrogate Model for Organic Film Deposition in OLED Lighting

Yuta YAMAGUCHI, Takaaki MIURA, Masashi NISHIYAMA

In this paper, we construct a dataset consisting of paired diffuser-plate images and thickness-distribution images, and evaluate the computational cost and prediction accuracy of an image-to-image translation surrogate model that directly predicts thickness-distribution images from diffuser-plate drawings. In conventional fluid simulation, computing thickness-distribution images from diffuser-plate drawings entails a substantial computational cost. The proposed image-to-image translation surrogate model significantly reduces the computational cost of predicting thickness-distribution images by employing a deep learning-based image-to-image translation method, compared with fluid simulation. Experimental results showed that predicting a single thickness-distribution image required an average of 3.3 hours with fluid simulation, whereas the proposed image-to-image translation surrogate model required an average of 122.0 milliseconds. In the image-to-image translation surrogate model, experimental results confirmed that Pix2Pix, which is one of the image-to-image translation techniques, achieved smaller errors relative to fluid simulation than the other evaluated methods.

Key words: Image-to-image translation techniques, Surrogate model, Diffuser plate, Thickness distribution, Organic film, OLED lighting

1. はじめに

Light Emitting Diode (LED) 照明は、高効率かつ長寿命であるため、一般照明として普及が進んでいる。一方で、青色波長に依存した光は、光害や健康への影響^{1,2)}が懸念されている。これらを解決する手段として、青色波長に依存せず発光する Organic LED (OLED) 照明^{3,4)}が注目を集めている。OLED 照明は、ガラス基板上に有機材料で製膜された有機膜に電流を流すことで発光する。有機膜は非常に薄いため、ガラス基板上に製膜された有機膜の膜厚分布がばらつきやすい。このような膜厚分布のばらつきは、OLED 照明の品質を大きく左右する。

非常に薄い有機膜を製膜するためには、一般的に真空蒸着が用いられる。真空蒸着では、ガラス基板に有機材料を気化させた材料ガスを吹き付けることで有機膜が製膜される。真空蒸着に用いる蒸着装置において、有機膜の膜厚分布を変化させるため、分散板と呼ばれる部品が使用されている。分散板は、金属板に多数の孔を空けた多孔質板である。分散板は、その孔の大きさと孔の配置とで材料ガスの流れを変化させ、最終的に製膜される有機膜の膜厚分布のばらつきに影響を与えている。

近年では、新しい蒸着装置を開発するため、技術者が分散板を設計する際、計算機上での流体シミュレーションを活用し始めている。流体シミュレーションは、流体力学に基づく数値計算によって、材料ガスの流れから膜厚分布を仮想的に算出する。ただし、流体シミュレーションを用いて分散板の図面から

膜厚分布を算出するためには、莫大な計算コストが発生する。具体的には、流体力学に基づく数値計算を行うために、材料ガスの流れる蒸着装置内部を計算機上に精密に再現する事前準備が必要になる。また、流体シミュレーションで算出される膜厚分布が、実機で製膜された膜厚分布へ近づくまでに長時間の数値計算を要する。

そこで本論文では、分散板の図面と膜厚分布画像とがペアになったデータセットを構築し、分散板の図面から膜厚分布画像を直接予測する画像変換サロゲートモデルを設計し、そのモデルの計算コストと予測精度とを評価した。本論文の画像変換サロゲートモデルでは、深層学習に基づく画像変換手法を用いる。本論文の主な貢献点は、以下の3点である。

- **貢献 1:** 流体シミュレーションを用いて、分散板の図面と膜厚分布画像とがペアとなったデータセットを新たに構築した。孔の大きさや配置を変えた分散板を用いて算出された有機膜の膜厚分布画像に関して、これまでデータセットが構築された事例はなかった。本論文では、様々なバリエーションの分散板の図面を準備し、ペアとなる膜厚分布画像を流体シミュレーションにより算出した。
- **貢献 2:** 画像変換サロゲートモデルにおいて、深層学習に基づく画像変換手法を適用することで、膜厚分布画像を予測するまでの計算コストを削減した。流体シミュレーションを用いて膜厚分布画像を算出するには、分散板の図面を用いた事前準備と数値計算とを要する。本論文では、画像変換手法へ分散板の図面を直接入力することで、事前準備を不要にし、数値計算にかかる時間を短縮した。
- **貢献 3:** Generative Adversarial Network (GAN) と Diffusion Model (DM) とをベースとした画像変換手法の中から画像

* 原稿受付 令和 7 年12月23日

* 掲載決定 令和 8 年8月20日

** 鳥取大学大学院工学研究科 (鳥取市湖山町南 4 丁目 101)

† 株式会社カネカ (東京都港区赤坂 1-12-32 アーク森ビル)

変換サロゲートモデルに最も適した手法を明らかにした。これまでに様々な画像変換手法が提案されているが、有機膜の蒸着に関する画像変換サロゲートモデルを評価した事例はなかった。本論文では、流体シミュレーションで算出された膜厚分布画像との誤差を指標として、GAN ベースと DM ベースとの画像変換手法を適用したサロゲートモデルの予測精度を比較した。

本論文では、孔の大きさと孔の配置とを変えた 1650 個の分散板の図面を準備し、分散板・膜厚分布データセットを構築した。実験結果より、流体シミュレーションでは平均 3.3 時間で 1 個の膜厚分布画像を算出するのに対して、画像変換サロゲートモデルでは平均 122.0 ミリ秒で 1 個の膜厚分布画像を予測できることを確認した。また、GAN ベースの画像変換手法である Pix2Pix を適用した画像変換サロゲートモデルで予測された膜厚分布画像は、他の画像変換手法を適用した画像変換サロゲートモデルで予測された膜厚分布画像と比較して、流体シミュレーションで算出された膜厚分布画像との誤差が最も小さいことを確認した。以下では、2. で関連研究を述べ、3. で分散板・膜厚分布データセットについて述べ、4. で画像変換サロゲートモデルの性能評価について述べる。最後に 6. でまとめる。

2. 関連研究

2.1 サロゲートモデル

サロゲートモデルとは、計算機上での数値計算を用いたシミュレーションから算出される解析結果を、機械学習や深層学習を用いて近似するモデルの総称である。特に、流体シミュレーションを対象としたサロゲートモデルは、計算機上での数値計算の時間を大幅に短縮できるため、様々な流体を対象とした研究が進んでいる。具体例として、液滴の蒸発速度を予測するサロゲートモデル⁵⁾や外気の流入による室内空気の変化を予測するサロゲートモデル⁶⁾が提案されている。また、無人潜水機の形状から水の抵抗を予測するサロゲートモデル⁷⁾や航空機の翼形状から空気の流れの変化を予測するサロゲートモデル⁸⁾なども提案されている。

本論文の応用目的と類似する例として、蒸着装置の機械部品の形状から材料ガスの流速を予測するサロゲートモデル⁹⁾が提案されている。このサロゲートモデルでは、分散板の図面から孔の面積比率を数値パラメータとして設定し、モデルの入力としている。ただし、このサロゲートモデル⁹⁾では、分散板の重要な要素である孔の配置が全く考慮されていない。本論文のサロゲートモデルでは、分散板の図面を画像としてモデルに直接入力することで、分散板の孔の大きさと孔の配置とを同時に取り扱うことを狙う。

2.2 画像変換手法

あるドメインの画像を入力として、別のドメインの画像を生成する画像変換手法が注目を集めている。GAN をベースとした画像変換手法である Pix2Pix¹⁰⁾や Bicycle GAN¹¹⁾は、あるドメインの画像と別のドメインの画像とがペアとなっているサンプルを用いて、画像変換を学習している。また、Cycle GAN¹²⁾や Dual GAN¹³⁾は、各ドメインで独立に収集された画像の非ペアサンプルを対象とした画像変換を学習している。近年では、DM ベースの画像変換手法も登場している。Palette¹⁴⁾ではノイズ画像に入力画像を結合して条件付けをすることで、画像変

換を学習している。また、ブラウン橋過程に基づく BBDM¹⁵⁾やシュレーディンガー橋過程に基づく I2SB¹⁶⁾などの画像変換に特化した手法も提案されている。さらに、DiffI2I¹⁷⁾では、入力画像からの特徴抽出の学習と逆拡散過程の学習とを二段階に分けることで、画像変換の予測精度を高める手法が提案されている。

画像変換手法は様々な分野への応用が期待されており、近年ではサロゲートモデルに応用した事例¹⁸⁾も登場しつつある。この事例では、建物の窓の配置から室内に流れ込む空気の流れを、Pix2Pix を適用したサロゲートモデルで予測している。ただし、この事例では Pix2Pix のみでサロゲートモデルを評価しており、他の画像変換手法を適用した場合の性能比較がされていない。本論文では、GAN ベースや DM ベースの画像変換手法を適用した画像変換サロゲートモデルを複数用いて、画像変換手法の違いによる膜厚分布画像の予測精度を比較する。

3. 分散板・膜厚分布データセット

3.1 概要

分散板の図面と膜厚分布画像とがペアとなった分散板・膜厚分布データセットを構築する。始めに、流体シミュレーションにおいて分散板の図面から膜厚分布画像を算出するまでの工程を設定する。具体的には 3.2 節で説明する。次に、流体シミュレーションの数値計算に必須となる流体モデルにおいて、その事前準備にかかる手間と数値計算にかかる時間との関係について述べる。具体的には 3.3 節で説明する。また、分散板の図面から膜厚分布画像を算出するまでの各工程にかかる時間を計測することで、流体シミュレーションにおける計算コストを評価する。具体的には 3.4 節で説明する。孔の大きさと孔の配置とを変えた多数の分散板の図面を準備し、その図面 1 個ずつで流体シミュレーションを実施することにより分散板・膜厚分布データセットを構築する。具体的には 3.5 節で説明する。最後に、構築した分散板・膜厚分布データセットに含まれる分散板の図面と膜厚分布画像のペアサンプルの例を紹介する。具体的には 3.6 節で説明する。

3.2 流体シミュレーションの工程

流体シミュレーションにおいて、分散板の図面を入力として、膜厚分布画像を出力するまでの工程を図 1 に示す。始めに、孔の大きさと孔の配置とを変えた分散板の図面を入力する。工程 A では、分散板の図面を材料ガスの流れの数値計算に反映するために、蒸着装置内部の空間である流体モデルを作成する。工程 B では、数値計算を可能にするために、流体モデルを微細なメッシュに分割する。工程 C では、流体モデルを用いて材料ガスの流れを数値計算で再現し、ガラス基板上に蒸着する膜厚を算出する。最後に、ガラス基板上の指定した座標から膜厚をサンプリングして、膜厚分布画像を出力する。

3.3 流体モデルの事前準備にかかる手間と数値計算にかかる時間

流体シミュレーションの数値計算を行うためには、蒸着装置内部の空間を計算機上に再現した流体モデルが必要になる。流体モデルは、3.2 節で述べた図 1 の工程 A で作成される。流体モデルは、蒸着装置内部に取り付けられた部品群の空間から、材料ガスの流れる空間のみを抽出することで作られる。その部品群を図 2(a) に示す。部品群は、整流板、分散板、加熱板で構成されている。中でも、分散板は材料ガスの流れに最も影響を

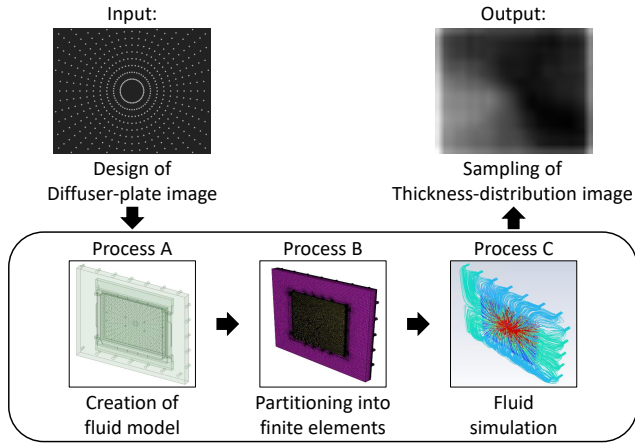


Fig. 1 Process of fluid simulation

与える部品である。計算機上に再現された蒸着装置内部の断面図を図 2(b) に示す。部品群は、ガラス基板の真下に配置されており、最終的な膜厚分布のばらつきを決定している。材料ガスは流入口から配管内へ流れ、シャワーリングから蒸着装置内部へ供給される。供給された材料ガスは、蒸着装置内部で広がりながら流れ、整流板で収束される。整流板を通過した材料ガスは、分散板を通じてガラス基板に対して水平方向に分散される。分散板は、その孔の大きさと孔の配置に応じて材料ガスの流れを変化させ、膜厚分布のばらつきに大きな影響を与える。分散した材料ガスは加熱板でエネルギーを与えられ、ガラス基板表面で急速に冷却されることで蒸着される。計算機上に再現された蒸着装置から材料ガスが流れる空間のみを抽出した流体モデルを図 2(c) に示す。流体モデルは、材料ガスが流入する Inlet 領域、材料ガスの残渣が排気される Outlet 領域、Inlet 領域から Outlet 領域まで材料ガスが流れる流体領域で構成される。

流体シミュレーションでは、分散板の図面が変更されると、流体モデルを全て作り直す必要があるため、事前準備に手間がかかる。また、流体力学に基づく数値計算を行うために、流体モデルを微細なメッシュに分割する必要がある。このメッシュ分割の工程は、3.2 節で述べた図 1 の工程 B で行われている。流体シミュレーションで算出される膜厚分布画像を、実際に成膜された膜厚分布に近づけるためには、メッシュの大きさを微細にする必要がある。ただし、メッシュの大きさを微細にするほど、図 1 の工程 C における流体力学に基づく数値計算の時間が長くなる。よって、流体シミュレーションを用いて分散板の図面から膜厚分布画像を算出するためには、多くの計算コストを要する。

3.4 流体シミュレーションの各工程における計算コストの評価

流体シミュレーションの各工程における計算コストを評価した。分散板・膜厚分布データセットの中から無作為に選んだ 5 サンプルを対象として、3.2 節で述べた各工程にかかる時間を計測した。計算機リソースとして、Intel Xeon w5-3435X を使用し、並列計算に使用した CPU 数は、工程 A で 1 個、工程 B と工程 C で 12 個とした。流体シミュレーションを実行するためには、汎用流体解析パッケージソフトを一般的に用いた。本

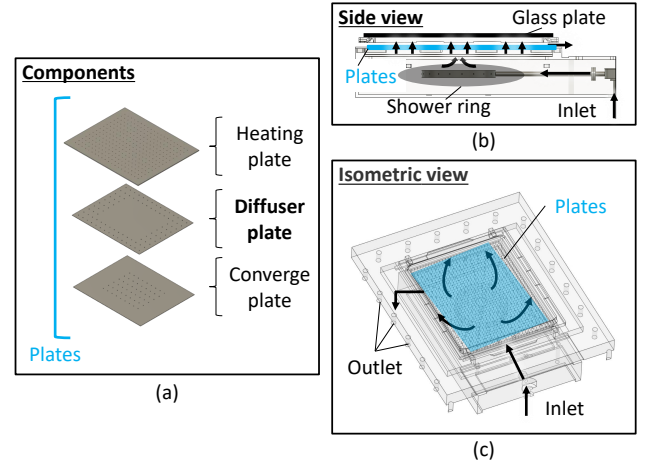


Fig. 2 Overview of fluid model

Table 1 Computational cost of each process in the fluid simulation (minutes)

Sample	Process A	Process B	Process C	Total
1	2.3×10^1	1.8×10^1	1.2×10^2	1.6×10^2
2	1.7×10^1	1.5×10^1	1.8×10^2	2.1×10^2
3	3.2×10^1	1.8×10^1	2.4×10^2	2.9×10^2
4	2.1×10^1	1.6×10^1	1.6×10^2	2.0×10^2
5	1.9×10^1	1.6×10^1	1.1×10^2	1.4×10^2
Average	2.2×10^1	1.6×10^1	1.6×10^2	2.0×10^2

論文では、その一種である ANSYS FLUENT^{*1}を用いた。

選んだサンプルにおける各工程の計算コストを表 1 に示す。実験結果より、1 個の分散板の図面から膜厚分布画像を算出するまでに平均 200 分を要しており、1650 個の分散板の図面から膜厚分布画像を算出するには約 7.6 か月必要となることが分かる。したがって、分散板の図面からペアとなる膜厚分布画像を、流体シミュレーションを用いてくり返し算出する際、流体モデルの事前準備、および、流体力学に基づく数値計算に長時間を要する。

3.5 分散板・膜厚分布データセットの構築

ここまで述べてきた流体シミュレーションを用いて、分散板の図面と膜厚分布画像とのペアであるデータセットを構築した。始めに、孔の大きさと孔の配置を変えた様々な分散板の図面を準備した。孔の大きさは直径 2.0 mm から 5.0 mm の範囲で定義した。なお、1 個の分散板に使用する孔の大きさは一定とした。孔の配置として、円形配置、矩形配置、放射形配置の 3 種類を用いた。孔の配置を変えた分散板の図面の例を図 3 に示す。実際の分散板は図 1 で示した様に長方形であるが、一般的な画像変換手法の入力に合わせるために正方形にリサイズした。分散板の図面において、孔の空いている領域の画素値を 255、孔の空いていない画素値を 128 とした。各配置でパラメータをランダムに変えながら 550 個のパターンを作成し、合計で 1650 個の分散板の図面を準備した。以下に、各配置の詳細を示す。

- 円形配置では、あらかじめ定めた基準座標を中心として、同心円の円周上に等間隔で孔を配置した。その例を図 3(a)

^{*1} <https://www.ansys.com/products/fluids/ansys-fluent>

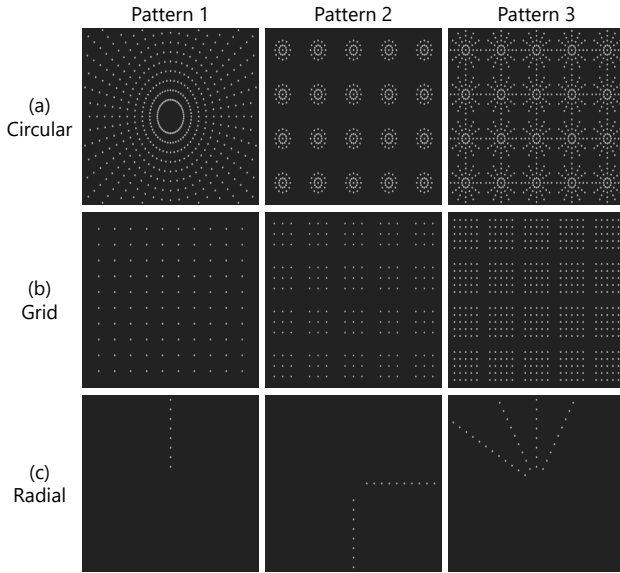


Fig. 3 Example of design patterns for diffuser-plate images

に示す．図中のパターン 1 では，分散板中心を基準座標として孔を配置した．図中のパターン 2，パターン 3 では，分散板を 4×5 に分割し，各分割領域の中心を基準座標として孔を配置した．円形配置の各パターンを作成するためのパラメータとして，同心円の数，分割数，同心円の半径，円周上の孔数，孔の大きさを用いた．

- 矩形配置では，あらかじめ定めた基準座標を中心として，グリッドに沿って等間隔に孔を配置した．その例を図 3(b) に示す．図中のパターン 1 では，分散板中心を基準座標として孔を配置した．図中のパターン 2，パターン 3 では，分散板を 4×5 に分割し，各分割領域の中心を基準座標として孔を配置した．矩形配置の各パターンを作成するためのパラメータとして，グリッドの縦方向の孔数，グリッドの横方向の孔数，分割数，孔の大きさを用いた．
- 放射形配置では，分散板中心を基準座標として，外周方向に延びる直線上に孔を等間隔で配置した．その例を図 3(c) に示す．図中のパターン 1，パターン 2，パターン 3 では，直線の本数と直線の角度とを変えて孔を配置した．放射形配置の各パターンを作成するためのパラメータとして，直線の本数，直線の角度，直線上に配置する孔数，および孔の大きさを用いた．

次に，準備した分散板の図面を入力として流体モデルを作成し，そのモデルを微細なメッシュへ分割した．分割した流体モデルを用いてガラス基板上の膜厚を数値計算により算出した．OLED 照明の製品となる位置を基準として，ガラス基板上から膜厚を等間隔に 20×25 点でグリッドサンプリングした．サンプリングされた膜厚を 2 次元平面にプロットし，膜厚分布画像を算出した．最後に，分散板の図面と膜厚分布画像を 256×256 にリサイズし，ペアサンプルとして格納した．なお，画像のリサイズ時にはバイリニア補間を適用した．算出された膜厚分布画像の例を図 4 に示す．膜厚分布画像では，サンプリングした膜厚の最大値が 255，最小値が 0 となるように正規化されている．黒い領域は相対的に膜厚が厚いことを表しており，反対に，白い領域は相対的に膜厚が薄いことを表している．

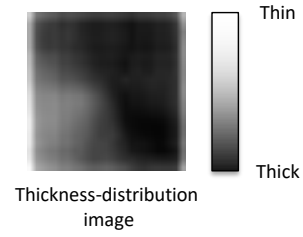


Fig. 4 Representation of thickness-distribution image

3.6 データセットの画像例

構築した分散板・膜厚分布データセットから，分散板の図面を変えた場合の膜厚分布画像の例を図 5 に示す．図中において，(a) から (h) は円形配置，(i) から (p) は矩形配置，(q) から (x) は放射形配置における分散板の図面と膜厚分布画像のペアを示している．構築したデータセットにおいて，分散板の図面と膜厚分布画像のペアには大きく 2 つの傾向が見られた．傾向 1 として，分散板の図面が異なるにも関わらず，膜厚分布画像が類似する傾向がみられた．図中 (a) および (b)，(g) から (j)，(o) および (p) にその例を示す．具体的には，膜厚分布画像の左下の領域が薄く，その他の領域が厚くなっていた．傾向 2 として，分散板の図面に応じて，膜厚分布画像が変化する傾向がみられた．図中 (c) から (f)，(k) から (n)，(q) および (r)，(t) から (x) にその例を示す．具体的には，分散板の図面において孔が密に配置されている領域に対応する膜厚分布画像の領域が厚くなり，それ以外の領域は薄くなっていた．これら 2 つの傾向を持つ膜厚分布画像を，両者とも安定に予測できる画像変換サロゲートモデルが必要となる．

4. 画像変換サロゲートモデルの評価

4.1 概要

構築した分散板・膜厚分布データセットを用いて画像変換サロゲートモデルを訓練し，その性能を評価する．始めに，画像変換サロゲートモデルにおいて，分散板の図面から膜厚分布画像を予測するまでの工程を設定する．具体的には 4.2 節で説明する．次に，GAN ベースや DM ベースの画像変換手法をサロゲートモデルへ適用する際のパラメータ設定について述べる．具体的には 4.3 節と 4.4 節とで説明する．画像変換サロゲートモデルの結果と，流体シミュレーションの結果とを比較することで，本論文の目的に適した画像変換手法を明らかにする．具体的には 4.5 節と 4.6 節と 4.7 節とで説明する．最後に，画像変換サロゲートモデルの訓練に使用するサンプル数を減らした場合における予測精度の変化を評価する．具体的には 4.8 節で説明する．

4.2 画像変換サロゲートモデルの工程

画像変換サロゲートモデルにおいて，分散板の図面を入力し，膜厚分布画像を出力するまでの工程を図 6 に示す．本論文ではサロゲートモデルの画像変換手法へ，分散板の図面を画像としてそのまま入力することにより，分散板の重要な要素である孔の大きさと孔の配置とを同時に取り扱うことを狙う．また，分散板の図面から膜厚分布画像を直接予測することで，3.3 節で述べた流体モデルの事前準備そのものを不要にすることを狙う．さらに，膜厚分布画像の予測に画像変換手法を用いることで，3.3 節で述べた流体力学に基づく数値計算と比べて，計

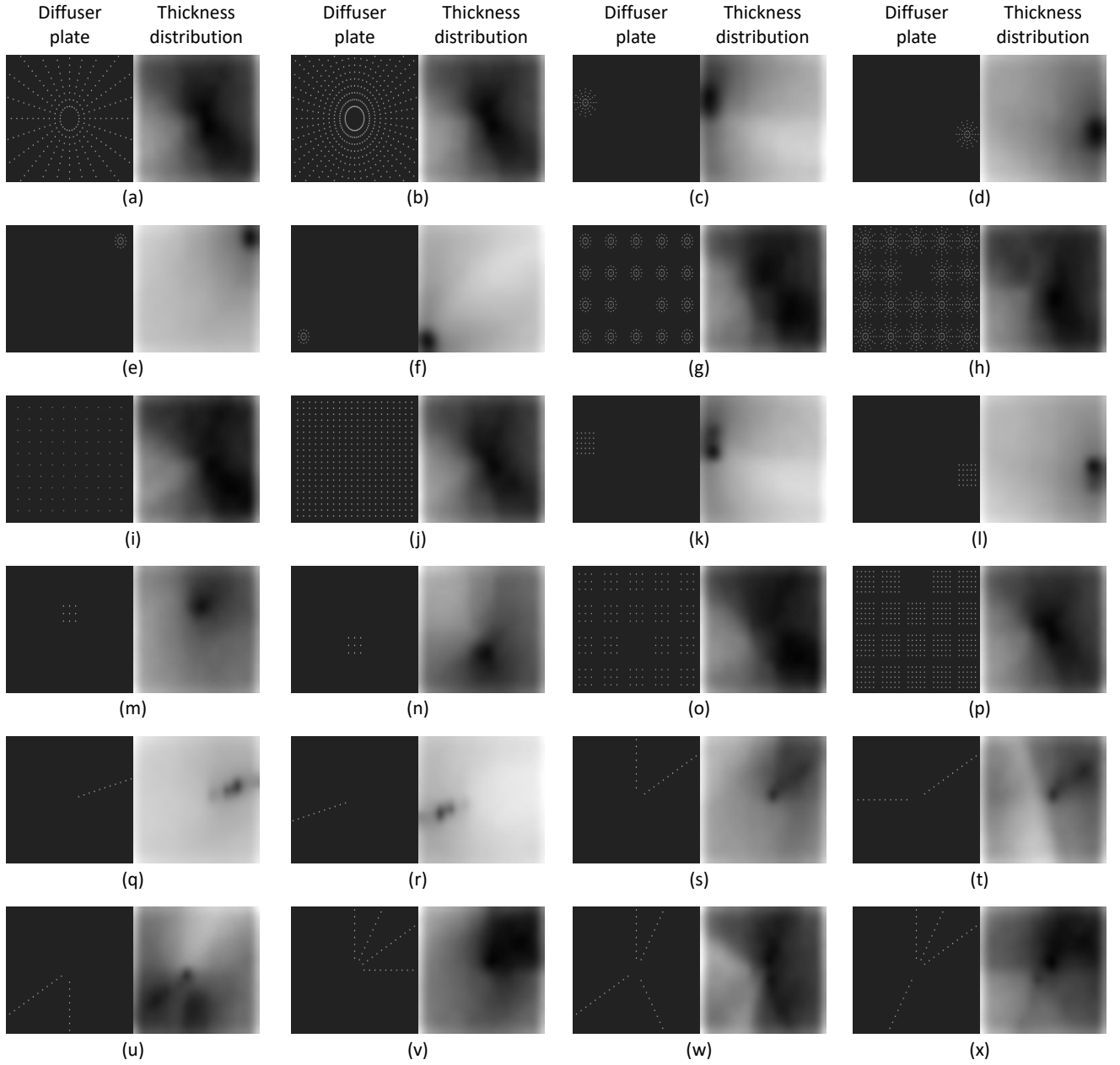


Fig. 5 Examples of paired diffuser-plate images and thickness-distribution images in the dataset

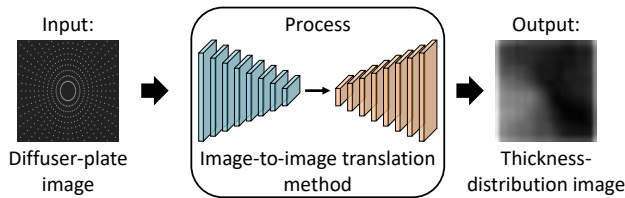


Fig. 6 Process of image-to-image translation surrogate model

算時間を大幅に削減することを狙う。

4.3 画像変換手法をサロゲートモデルへ適用する際のパラメータ設定

画像変換サロゲートモデルでは、適用する画像変換手法によって膜厚分布画像の予測精度が大きく変わると想定される。

本論文では、分散板の図面から、そのペアとなる膜厚分布画像を予測するために、既存の画像変換手法のパラメータを一部変更して適用した。その他のパラメータを参考文献に従い設定した。参考文献に記載が無かったパラメータについては、公開ソースコードで使用されている値を用いた。以下では、GANベースの画像変換手法の設定について述べる。

- Pix2Pix¹⁰⁾: 入力画像と出力画像とがペアであることを前提として、カラー画像からカラー画像を生成する手法である。本論文では入力画像や出力画像のチャンネル数を1に制限し、L1損失の係数を1として、画像変換サロゲートモデルに適用した。
- Bicycle GAN¹¹⁾: 入力画像と出力画像とがペアであることを前提として、潜在ベクトルと画像の対応関係を双方向に訓練する手法である。本論文では入力画像や出力画像の

- チャンネル数を 1 に制限し、潜在から出力画像を生成する cLR-GAN のみを画像変換サロゲートモデルに適用した。さらに、安定学習のために勾配クリッピングを導入した。
- Cycle GAN ¹²⁾: 入力画像と出力画像とが非ペアであることを前提として、サイクル一貫性損失を用いて訓練する手法である。本論文ではペア画像を前提としているため、Image pool を排除して訓練を安定にすることで、画像変換サロゲートモデルに適用した。
 - Dual GAN ¹³⁾: 入力画像と出力画像とが非ペアであることを前提として、Dual learning の枠組みを用いて訓練する手法である。本論文ではペア画像を前提としているため、バッチシャッフルを排除して訓練を安定にすることで、画像変換サロゲートモデルに適用した。

次に、DM ベースの画像変換手法の設定について述べる。

- Palette ¹⁴⁾: ノイズ画像と入力画像とをチャンネル方向に結合した画像から出力画像を生成する手法である。本論文では入力画像と出力画像とのチャンネル数を 1 に制限し、計算負荷を軽減するために自己注意層を 1 層のみとした構成で画像変換サロゲートモデルに適用した。
- BBDM ¹⁵⁾: ブラウン橋過程に基づき、入力画像と出力画像とを潜在空間に写像し、特徴量間の変化を訓練する手法である。本論文では入力画像や出力画像のチャンネル数を 1 に制限し、潜在ベクトルの次元数を 4、ダウンサンプリング係数を 8、コードブックサイズを 1024 として、画像変換サロゲートモデルに適用した。
- I2SB ¹⁶⁾: シュレーディンガー橋過程に基づき、入力画像と出力画像とのペアから画像間の変化を訓練する手法である。本論文では入力画像や出力画像のチャンネル数を 1 に制限し、初期フィルタ数を 48、時間埋め込み次元数を 512 として、画像変換サロゲートモデルに適用した。
- DiffI2I ¹⁷⁾: 入力画像から Transformer で抽出した特徴量を用いて、出力画像を生成する手法である。本論文では入力画像や出力画像のチャンネル数を 1 に制限し、さらに Transformer の計算負荷を軽減するために画像サイズを 128×128 にリサイズした。また、拡散過程のノイズ量 β を 1×10^{-4} から 2×10^{-2} の範囲とし、拡散ステップ数は 1000 とした。

4.4 画像変換サロゲートモデルを訓練する際の条件

画像変換サロゲートモデルを 3.5 節で述べた分散板・膜厚分布データセットを用いて訓練した。画像変換サロゲートモデルの予測精度を評価するために、5-fold cross validation を行った。分散板の図面と膜厚分布画像とのペアサンプル 1650 個を 5 つのサブセットへ均等個数に分割した。各サブセットのペアサンプル数を 330 個とした。5-fold cross validation では、反復の各回においてそれぞれ 1 つのサブセットをテストサンプルに、残り 4 つを訓練サンプルに用いた。モデルを訓練する際の学習率は 0.0002 で固定とした。訓練時のエポック数は 1000 とした。最適化関数として adam を適用した。

評価指標として、Mean Squared Error (MSE) を用いた。テストサンプルにおいて、画像変換サロゲートモデルを用いて予測された膜厚分布画像と、流体シミュレーションで算出された膜厚分布画像とを比較し、MSE を 100 エポック毎に算出した。算出された MSE の中で、最も低い値を画像変換サロゲートモ

Table 2 Prediction accuracy comparison of image-to-image translation surrogate models

Model	Approach	MSE ↓
Pix2Pix ¹⁰⁾	GAN	109
Bicycle GAN ¹¹⁾	GAN	140
Cycle GAN ¹²⁾	GAN	6061
Dual GAN ¹³⁾	GAN	6485
Palette ¹⁴⁾	DM	10428
BBDM ¹⁵⁾	DM	6870
I2SB ¹⁶⁾	DM	4626
DiffI2I ¹⁷⁾	DM	942

デルの予測精度とした。

4.5 画像変換サロゲートモデルの予測精度の結果

4.3 節で述べた画像変換手法を適用したサロゲートモデルの予測精度を表 2 に示す。GAN ベースの画像変換手法の中では、ペア画像を前提とした Pix2Pix の MSE が最も低かった。また、Bicycle GAN の MSE は、Pix2Pix の MSE に次いで低かった。一方、非ペア画像を前提とした Cycle GAN の MSE は、Pix2Pix の MSE および Bicycle GAN の MSE と比較して高かった。Dual GAN の MSE は、Cycle GAN の MSE と同程度であった。このことから、GAN ベースの画像変換手法の中では、ペア画像を前提とした Pix2Pix を適用した画像変換サロゲートモデルの予測精度が良いと言える。

DM ベースの画像変換手法の中では、DiffI2I の MSE が最も低かった。I2SB の MSE は、DiffI2I の MSE に次いで低かった。また、BBDM の MSE は、DiffI2I の MSE および I2SB の MSE と比較して高かった。Palette の MSE は、他の DM ベースの MSE と比較して突出して高かった。ただし、いずれの DM ベースの手法の MSE も、GAN ベースの Pix2Pix の MSE より高かった。

DiffI2I では Transformer の計算負荷を軽減するために、入力画像および出力画像のサイズを 128×128 にリサイズしていた。この画像サイズの違いが評価の公平性に影響を与える可能性を考慮し、最も低い MSE を示した Pix2Pix において、入力画像および出力画像のサイズを、256×256 から 128×128 に落として予測精度の評価を行った。実験結果では、低サイズの Pix2Pix において MSE は 111 であり、表 2 に示した 256×256 にリサイズした時の Pix2Pix の 109 と比較して、ほぼ変わらない値を示した。

以上の結果より、有機膜の蒸着に関する画像変換サロゲートモデルにおいて、Pix2Pix は比較した画像変換手法の中で最も良い予測精度を示した。

4.6 画像変換サロゲートモデルで予測された膜厚分布画像の定性評価

Pix2Pix を適用した画像変換サロゲートモデルを用いて予測された膜厚分布画像の例を図 7 に示す。図中 (a) から (r) において、左は入力された分散板の図面、中央は流体シミュレーションで算出された膜厚分布画像、右は画像変換サロゲートモデルで予測された膜厚分布画像を示す。また、図中 (a) から (f) は 3.5 節で述べた円形配置の分散板の図面を入力した場合の膜厚分布画像の例を示す。同様に、図中 (g) から (l) は矩形配置、図中 (m) から (r) は放射形配置の分散板の図面を入力した場合の膜厚分布画像の例をそれぞれ示す。

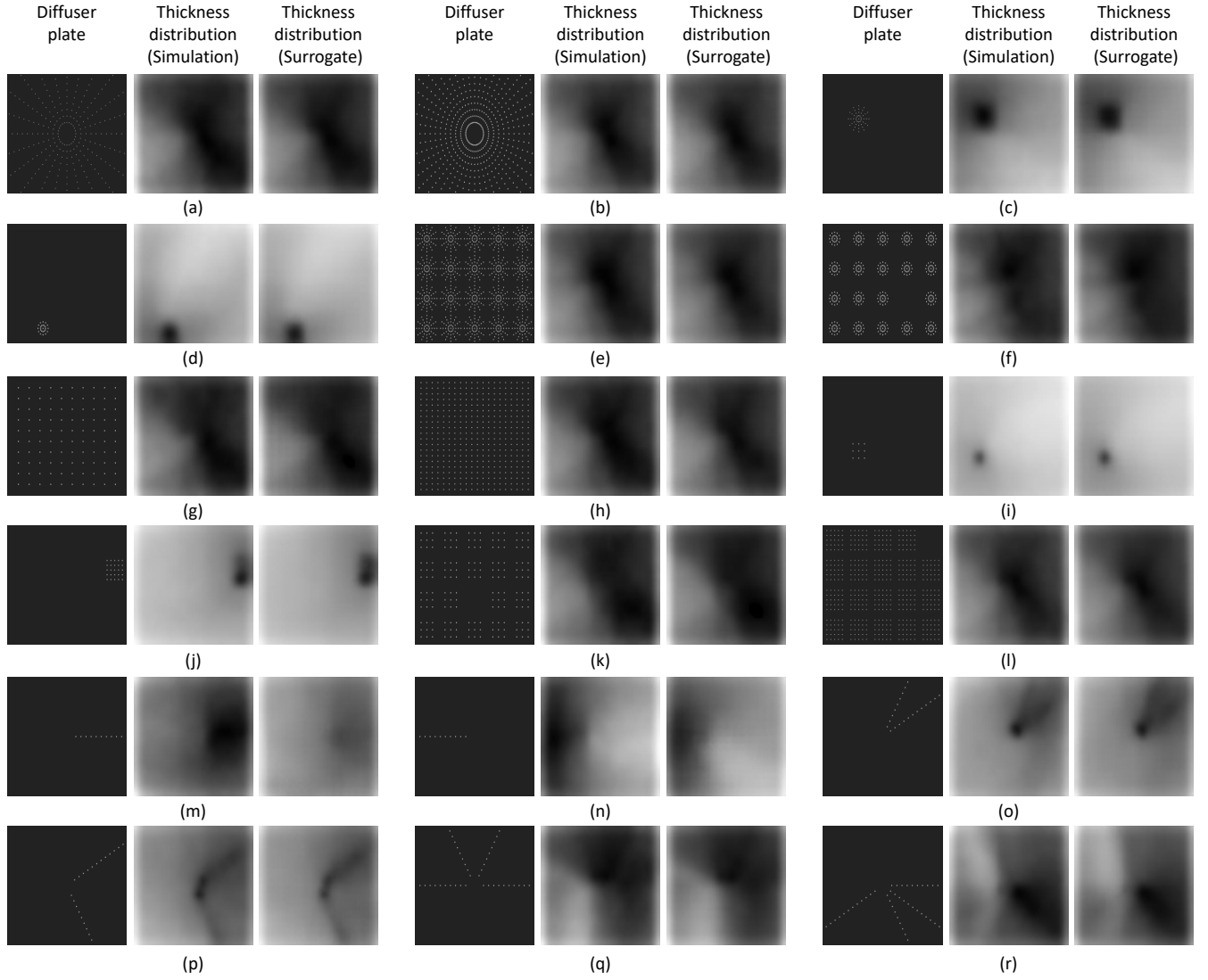


Fig. 7 Comparison between the thickness-distribution image generated by the image-to-image translation surrogate model and those calculated by fluid simulation

画像変換サロゲートモデルで予測された膜厚分布画像と流体シミュレーションで算出された膜厚分布画像とを比較した。図中 (a) から (l), および, (o) から (r) では, 画像間の見た目の差異が小さかった。ただし, 図中 (m) や (n) では, 画像間の見た目の差異が大きい場合もあった。図中で示したサンプルの多くにおいて, 画像変換サロゲートモデルで予測された膜厚分布画像は, 流体シミュレーションで算出された膜厚分布画像を忠実に再現できていると言える。

さらに, 画像変換手法の違いによって予測された膜厚分布画像がどのように変化するかを評価した。可視化する画像変換手法として, 4.5 節で評価した GAN ベースの画像変換手法の中から, MSE が低かった Pix2Pix と bicycle GAN を選択した。また, DM ベースの画像変換手法の中から, MSE が低かった DiffI2I と I2SB を選択した。選択された画像変換手法を用いたサロゲートモデルにより予測された膜厚分布画像の例を図 8 に示す。図中 (a) は入力する分散板の図面, (b) は流体シミュレーションで算出された正解の膜厚分布画像, (c) から (f) はそれぞれの画像変換手法を用いた画像変換サロゲートモデルで予測さ

れた膜厚分布画像を示す。図中 (c) の Pix2Pix と (d) の bicycle GAN で予測された膜厚分布画像は, 正解の見た目をほぼ忠実に再現できていた。一方で, 図中 (e) の DiffI2I と (f) の I2SB の膜厚分布画像は, 正解と見た目が大きく離れており, 上手く予測できていなかったと言える。

4.7 画像変換サロゲートモデルにおける計算コストの評価

画像変換サロゲートモデルにおける計算コストを, 流体シミュレーションにおける計算コストと比べることで評価した。3.4 節で選んだ 5 サンプルを対象として, 画像変換サロゲートモデルの各工程にかかる時間を計測した。

各サンプルにおける各工程の計算コストを表 3 に示す。3.2 節で述べた流体シミュレーションの事前準備に関する工程 A と工程 B は, 画像変換サロゲートモデルには不要となったため, 計算コストを 0 分とした。次に, 3.2 節で述べた流体シミュレーションの数値計算に関する工程 C について, 画像変換サロゲートモデルにおける Pix2Pix の推論に要する計算時間を比較対象とした。この推論には GPU を用いることが一般的だが, 本論文では流体シミュレーションの計算コストと比較するため

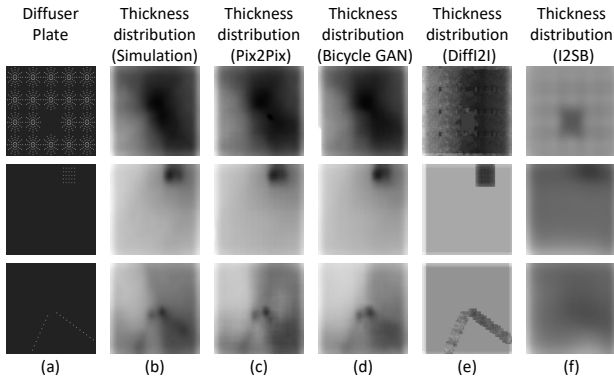


Fig. 8 Comparison of thickness-distribution images predicted by image-to-image translation surrogate models using (c) Pix2Pix, (d) Bicycle GAN, (e) DiffI2I, and (f) I2SB

Table 3 Computational cost of each process in the image-to-image translation surrogate model (minutes)

Sample	Process A	Process B	Process C	Total
1	0.0	0.0	1.1×10^{-3}	1.1×10^{-3}
2	0.0	0.0	8.7×10^{-4}	8.7×10^{-4}
3	0.0	0.0	1.1×10^{-3}	1.1×10^{-3}
4	0.0	0.0	2.8×10^{-3}	2.8×10^{-3}
5	0.0	0.0	4.3×10^{-3}	4.3×10^{-3}
Average	0.0	0.0	2.0×10^{-3}	2.0×10^{-3}

に、CPU である Xeon(R) w5-3435X のみを使用した。表 3 において、画像変換サロゲートモデルの工程 C は 1 個あたり平均 0.002 分で膜厚分布画像を予測できることを確認した。これは、表 1 の流体シミュレーションの工程 C と比較して、1 個あたりの計算コストが約 1/80000 に短縮されたことに相当する。よって、画像変換サロゲートモデルでは、計算コストを大幅に削減できたとと言える。

4.8 訓練サンプル数を減らした場合の画像変換サロゲートモデルの予測精度

訓練サンプル数を減らした場合において、Pix2Pix を適用した画像変換サロゲートモデルの予測精度の変化を評価した。5-fold cross validation を行うために、1650 個のペアサンプルを均等に 5 つのサブセットに分割した。各反復において、訓練サンプル数は 1320 個、テストサンプル数は 330 個とした。このとき、訓練サンプル数 1320 個を 100% と定義し、訓練サンプル数を 25% ずつ減らしながら画像変換サロゲートモデルを訓練し、予測精度を算出した。訓練サンプルの偏りを避けるため、訓練サンプルから減らすサンプルをランダムに変更しながら、画像変換サロゲートモデルの訓練と推論とを 5 回繰り返した。なお、いずれの訓練サンプル数で学習されたモデルを評価する場合においても、テストサンプルは同一とした。その他の実験条件を、4.4 節と同一とした。

訓練サンプル数を変えた場合における画像変換サロゲートモデルの予測精度を図 9 に示す。図中の値は、各訓練サンプル数で訓練した画像変換サロゲートモデルの予測精度から求めた平均値と標準偏差を示す。訓練サンプル数を 50% まで削減した場合では、100% の場合と比べて予測精度が大きく変わらなかった。しかし、訓練サンプル数を 25% まで削減した場合は、100% の場合と比べて予測時の誤差が著しく増大した。訓

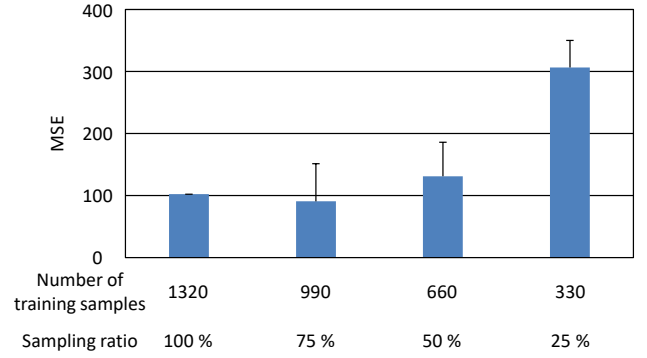


Fig. 9 Prediction accuracy of image-to-image translation surrogate model when reducing the number of training samples

練サンプル数が極端に減少すると予測精度が悪化するため、今後更なる画像変換手法の改良が必要である。

4.9 画像の幾何変形による精度への影響

本論文では、画像変換サロゲートモデルを訓練するための分散板・膜厚分布データセットを構築する際に、3.5 節で述べたように、分散板の図面と膜厚分布画像とに幾何変形を適用している。この幾何変形により、流体シミュレーションで算出された膜厚分布画像と画像変換サロゲートモデルで予測された膜厚分布画像との間で、誤差を発生させている可能性がある。誤差に特に影響すると考えられる幾何変形として、分散板の図面にアスペクト比の変換処理を施しており、膜厚分布画像にアップサンプリング処理を施している。幾何変形の処理にはいくつかの方法が考えられるため、その方法を変更した場合の画像変換サロゲートモデルの予測精度を比較した。

幾何変形の処理を変えた場合について、分散板の図面と膜厚分布画像のペアサンプルの例を図 10 に示す。分散板の図面のアスペクト比の変換処理では、画像の横幅を基準として、元画像が正方形となるようにリサイズする Stretch と、元画像のアスペクト比を維持するようにリサイズする Preservation とを比較した。なお Preservation では、深層学習に基づく一般的な画像変換手法の入力に合わせるために、画像の上下の余白に画像値 0 のパディング処理を適用することで正方形の画像サイズを維持した。次に、膜厚分布画像のアップサンプリング処理では、バイリニア補間とバイキュービック補間と最近傍補間とを比較した。実験では、画像変換サロゲートモデルへ適用する画像変換手法として Pix2Pix を適用した。その他の条件を 4.4 節と同一とした。なお、本論文の画像変換サロゲートモデルは、3.5 節で述べたように、上記の Stretch とバイリニア補間との組合せを採用している。

アスペクト比の変換処理とアップサンプリング処理とを変えた場合の画像変換サロゲートモデルの予測精度を表 4 に示す。アスペクト比の変換処理では、Stretch を適用した場合は、Preservation を適用した場合と比べて、MSE の僅かな低下が見られた。アップサンプリング処理では、バイリニア補間を適用した場合は、バイキュービック補間と最近傍補間を適用した場合と比べて、MSE の僅かな低下が見られた。ただし、MSE の低下は微小であるため、画像変換サロゲートモデルの予測精度において、画像の幾何変形の影響は小さいと考える。

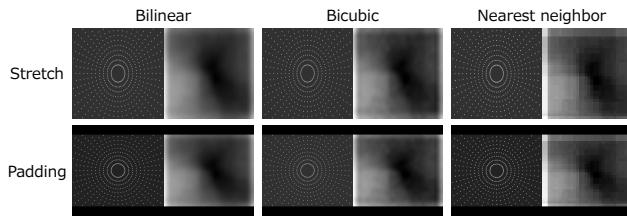


Fig. 10 Examples of diffuser-plate images and thickness-distribution images under different geometric transformations

Table 4 Prediction accuracy of the image-to-image translation surrogate model with Pix2Pix under different geometric transformations

Aspect ratio	Upsampling	MSE ↓
Stretch	Bilinear	109
Stretch	Bicubic	118
Stretch	Nearest neighbor	144
Preservation (Padding)	Bilinear	112
Preservation (Padding)	Bicubic	122
Preservation (Padding)	Nearest neighbor	166

5. 考察

5.1 画像変換サロゲートモデルの応用シナリオ

従来の応用では、技術者が分散板の図面を新しく設計する際、数値計算に基づく流体シミュレーションを適用することで、膜厚分布画像を算出していた。この流体シミュレーションには、3.3 節で述べたとおり、多大な計算コストと手間を要していた。本論文では、我々が設計した画像変換サロゲートモデルを用いることで、流体シミュレーションの計算コストと手間を半分に削減する応用シナリオを想定している。具体的には、分散板の図面において、孔の配置が類似したパターンに対する流体シミュレーションを削減することを考えている。類似する分散板の図面の一部を訓練サンプルとして準備することができれば、全ての分散板の図面を訓練サンプルに含めることなく、画像変換サロゲートモデルにより膜厚分布画像を予測することを期待している。これは、4.5 節や4.8 節で示した実験結果により実現可能性が高いと考えている。このように、類似する分散板の図面から訓練された画像変換サロゲートモデルで予測することで、分散板設計時の近傍探索に伴う流体シミュレーションの実施回数を削減する効果が期待される。

5.2 前提条件と適用範囲

本論文の画像変換サロゲートモデルで5.1 節の応用シナリオを実現するための前提条件として、分散板の図面が互いに類似していれば、膜厚分布画像も互いに類似した見た目になることが挙げられる。この前提条件を満たす具体例を図 11 に示す。図中 (a) と (b) に示す 2 つのペアサンプルは、分散板の図面の孔の配置が類似しており、かつ、膜厚分布画像の見た目も類似している。また、図中 (c) と (d) に示す 2 つのペアサンプルにおいても、同様の傾向である。類似するペアサンプルの内の片方が訓練サンプルに含まれている場合、画像変換サロゲートモデルの適用範囲内であると考えている。具体的には、(a) と (c) とを訓練サンプルに含むことができれば、(b) や (d) の分散板の

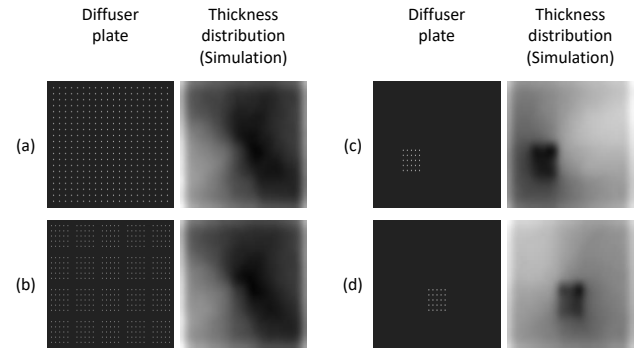


Fig. 11 Examples of pairs consisting of diffuser-plate images and their corresponding thickness-distribution images, where both the diffuser-plate images and the thickness-distribution images are similar between (a) and (b), and likewise similar between (c) and (d)

図面から膜厚分布画像を予測できると考えている。

一方で、図中 (a) のペアサンプルと (c) のペアサンプルとを比較すると、分散板の図面の孔の配置が大きく変わっており、かつ、膜厚分布画像の見た目も大きく離れている。この (a) のみを訓練サンプルとする場合、画像変換サロゲートモデルは、(c) の分散板の図面から膜厚分布画像を正確に予測できないと考えている。この場合には、画像変換サロゲートモデルの適応範囲外となり、流体シミュレーションを用いた数値計算で、訓練サンプルを新たに準備することが必要となる。さらに、蒸着装置の構成そのものや、材料ガスの流量や流量が変化した場合でも、適応範囲外となることが想定され、流体シミュレーションが必要になると考えている。

5.3 前提条件を満たす場合と満たさない場合の評価

まず、前提条件を満たす場合の評価を考察する。ここまでの実験では、5.2 節で述べた前提条件を満たすように設定していた。具体的には、3.5 節で構築した 3 つの配置に属するペアサンプルが、訓練サンプルとテストサンプルの両方で均等に含まれるように4.4 節でランダムにサンプリングしていた。よって、4.5 節や4.8 節では、分散板の図面と膜厚分布画像のペアサンプルが、訓練サンプルとテストサンプルとの間で類似する場合を評価しており、前提条件を満たしていれば高い予測精度が得られることを確認していた。

次に、前提条件を満たさない場合の評価を考察する。具体的には、分散板の図面と膜厚分布画像のペアサンプルが、訓練サンプルとテストサンプルとの間で類似しない場合の予測精度の評価を考える。ペアサンプルが類似しない場合として、3.5 節で述べた分散板の孔の配置で分類されたペアサンプルを、訓練とテストで個別に扱った。円形配置と矩形配置と放射形配置の 3 つの中から、任意に選んだ 2 つの配置に属するペアサンプルを訓練サンプルとし、残りの 1 つの配置に属するペアサンプルをテストサンプルとした。以下の実験では、画像変換サロゲートモデルへ適用する画像変換手法として Pix2Pix を用いた。5-fold cross validation における各反復において、訓練サンプル数は 880 個、テストサンプル数は 110 個とした。その他の条件を4.4 節と同一とした。

類似しないペアサンプルから訓練された画像変換サロゲートモデルの予測精度を表 5 に示す。表中の Training には、訓練サ

Table 5 Prediction accuracy of the image-to-image translation surrogate model when paired samples belonging to two of the three design patterns, namely circular, grid, and radial, are used for training and those belonging to the remaining design pattern are used for prediction

Training	Prediction	MSE ↓
Grid, Radial	Circular	1008
Circular, Radial	Grid	2194
Circular, Grid	Radial	5658

ンプルに用いた分散板の孔の配置を示し、Prediction には、テストサンプルに用いた分散板の孔の配置を示す。表中より、訓練サンプルが属する配置とテストサンプルが属する配置とが異なると、MSE の値は、全ての配置を訓練サンプルに含む場合の表 2 の Pix2Pix の 109 と比べて、大幅に悪化していることが分かった。前提条件を満たさない場合において画像変換サロゲートモデルの予測精度は大幅に低下するため、今後の課題として、流体の物理現象を導入した画像変換サロゲートモデルを設計することで、前提条件を緩和していくことが必要である。

6. まとめ

本論文では、分散板・膜厚分布データセットを構築し、分散板の図面から膜厚分布画像を予測する画像変換サロゲートモデルの計算コストと予測精度とを評価した。流体シミュレーションを用いて、孔の大きさと孔の配置とを変えた分散板の図面と膜厚分布画像とがペアとなったデータセットを構築した。画像変換手法を用いて、分散板の図面から膜厚分布画像を直接予測することで、計算コストを大幅に削減した。また、GAN ベースや DM ベースの画像変換手法を適用した画像変換サロゲートモデルを複数用いて、画像変換手法の違いによる膜厚分布画像の予測精度を比較し、Pix2Pix は他の画像変換手法と比べて流体シミュレーションの結果と近づくことを確認した。

今後の課題として、分散板・膜厚分布データセットを拡充し、画像変換サロゲートモデルの予測精度を検証することが挙げられる。また、分散板の図面を画像変換手法に入力する際のリサイズ方法が、画像変換サロゲートモデルの予測精度に及ぼす影響を検証することが挙げられる。さらに、実際の蒸着装置を用いて製膜された膜厚分布と比較する精度評価が挙げられる。

参 考 文 献

- 1) N. Schulte-Römer, J. Meier, M. Söding, and E. Dannemann. The led paradox: how light pollution challenges experts to reconsider sustainable lighting. *Sustainability*, Vol. 11, No. 21, p. 6160, 2019.
- 2) F. Behar-Cohen, C. Martinsons, F. Viénot, G. Zissis, A. Barlier-Salsi, J. Cesarini, O. Enouf, M. Garcia, S. Picaud, and D. Attia. Light-emitting diodes (led) for domestic lighting: any risks for the eye?

Progress in Retinal and Eye Research, Vol. 30, No. 4, pp. 239–257, 2011.

- 3) R. Liguori, F. Nunziata, S. Aprano, and M. G. Maglione. Overcoming challenges in oled technology for lighting solutions. *Electronics*, Vol. 13, No. 7, p. 1299, 2024.
- 4) A. Ishihara, I. Park, Y. Suzuki, K. Yajima, H. Cui, M. Yanagisawa, T. Sano, J. Kido, and K. Tokuyama. Metabolic responses to polychromatic led and oled light at night. *Scientific Reports*, Vol. 11, No. 1, p. 12402, 2021.
- 5) Y. Yan, X. Li, W. Sun, X. Fang, F. He, and J. Tu. Semi-surrogate modelling of droplets evaporation process via xgboost integrated cfd simulations. *Science of The Total Environment*, Vol. 895, p. 164968, 2023.
- 6) J. Luis-Gómez, F. Martínez, A. González-Barberá, J. Mascarós, G. Monrós-Andreu, S. Chiva, E. Borrás, and R. Martínez-Cuenca. Ai-driven surrogate model for room ventilation. *Fluids*, Vol. 10, No. 7, p. 163, 2025.
- 7) H. Vardhan, D. Hyde, U. Timalisina, P. Volgyesi, and J. Sztipanovits. Sample-efficient and surrogate-based design optimization of underwater vehicle hulls. *Ocean Engineering*, Vol. 311, p. 118777, 2024.
- 8) S. Bhatnagar, Y. Afshar, S. Pan, K. Duraisamy, and S. Kaushik. Prediction of aerodynamic flow fields using convolutional neural networks. *Computational Mechanics*, Vol. 64, No. 2, pp. 525–545, 2019.
- 9) Z. Jin, D. D. Lim, X. Zhao, M. Mamunuru, S. Roham, and G. X. Gu. Machine learning enabled optimization of showerhead design for semiconductor deposition process. *Journal of Intelligent Manufacturing*, Vol. 35, No. 2, pp. 925–935, 2024.
- 10) P. Isola, J. Zhu, T. Zhou, and A. A. Efros. Image-to-image translation with conditional adversarial networks. In *Proceedings of the IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition*, pp. 1125–1134, 2017.
- 11) J.-Y. Zhu, R. Zhang, D. Pathak, T. Darrell, A. A. Efros, O. Wang, and E. Shechtman. Toward multimodal image-to-image translation. *Advances in Neural Information Processing Systems*, Vol. 30, , 2017.
- 12) J.-Y. Zhu, T. Park, P. Isola, and A. A. Efros. Unpaired image-to-image translation using cycle-consistent adversarial networks. In *Proceedings of the IEEE International Conference on Computer Vision*, pp. 2223–2232, 2017.
- 13) Z. Yi, H. Zhang, P. Tan, and M. Gong. Dualgan: Unsupervised dual learning for image-to-image translation. In *Proceedings of the IEEE International Conference on Computer Vision*, pp. 2849–2857, 2017.
- 14) C. Saharia, W. Chan, H. Chang, C. Lee, J. Ho, T. Salimans, D. Fleet, and M. Norouzi. Palette: Image-to-image diffusion models. In *ACM SIGGRAPH 2022 Conference Proceedings*, pp. 1–10, 2022.
- 15) B. Li, K. Xue, B. Liu, and Y.-K. Lai. Bbdm: Image-to-image translation with brownian bridge diffusion models. In *Proceedings of the IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition*, pp. 1952–1961, 2023.
- 16) G.-H. Liu, A. Vahdat, D.-A. Huang, E. Theodorou, W. Nie, and A. Anandkumar. I²SB: Image-to-image schrödinger bridge. In *Proceedings of the 40th International Conference on Machine Learning*, pp. 22042–22062, 2023.
- 17) B. Xia, Y. Zhang, S. Wang, Y. Wang, X. Wu, Y. Tian, W. Yang, R. Timofte, and L. Van Gool. Diffi2i: Efficient diffusion model for image-to-image translation. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 2024.
- 18) Y.-J. Kim, M. Anis, and Y. K. Yi. Integrating pix2pix and computational fluid dynamics for enhanced indoor airflow prediction: A case study with wing-walls. *Journal of Building Engineering*, Vol. 91, p. 109517, 2024.