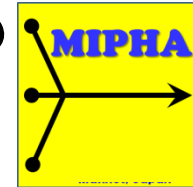


材料開発における 機械学習の活用 (マテリアルインフォマティクス)

名古屋大学大学院工学研究
科材料デザイン工学専攻
足立吉隆

2つの材料情報統合システム

“MIPHA”



(Materials Genome Integration System for Phase and Property Analysis)

- Script: Visual basic
- Metallurgically important image analysis
- Standalone system

“shinyMIPHA”



- Script: R
- Mathematically important image analysis and various machine learning modules
- Cloud system

MIPHA

選ぶだけで最先端の機械学習

* 新興精機より市販中

Metallurgically important image analysis

MIPHA 3.1.0

ヘルプ(H)

試料名
DP300 新規作成 試料詳細
連続一括処理実行

入力画像フォルダ
C:\Users\Yoshitaka Adachi\Desktop\microstru 参照

Width: 2560 Height: 1920
Voxel Size: x [] y [] z []

画像識別
Digits Server []

画像処理
前処理: 前処理後(ただしクロップ前)のWidth(pixel) 600
前処理マクロの読み込み
run("8-bit");run("Size...", "width=600 height=450 constrain average interpolation=Bilinear");run("Normalize Local Contrast", "block_radius_x=40 block_radius_y=40 standard_deviations=3 center stretch stack");//run("Brightness/Contrast...");run("Enhance Contrast", "saturated=0.35");run("Apply LUT", "stack");run("Stack-Reg", "transformation=[Rigid Body]");makeRectangle(48, 37, 500, 350);run("Crop");
 TWS Classifier 更新 F-M2.model
 処理完了後、フォルダを開く

画像解析
2D/3D共通設定
Voxel Size: x [4.2667] y [4.2667] z []
解析二値化画像
 前処理のみ TWS 全相一括 解析完了後、フォルダを開く

2D画像解析
解析対象粒子面積(ピクセル)
最小 [0] 最大 [10]
 境界に接する組織は解析対象としない
 組織内部の穴を埋める
2D解析項目 平均値 標準偏差
 個数、面積 真円度、凸度
 近似楕円 フェレ径

3D画像解析
 Avizo9.2/Amira6.2以上を使用する
Avizo/Amira実行ファイル [C:\Program Files] 参照
Class数: [2] スムージングしない
除外する粒子: [0] ポクセル以下
3D解析項目 平均値 標準偏差
 個数、体積 表面積 曲率 Genus 個別粒子形態解析
 フェレ径、真球度 フラクタル 分岐点解析(対象Class: [1] 分岐点統合距離: [0])

一括処理実行

特性推定
組織データ [] 参照
推定モデル [] 参照

逆解析
特性曲線ファイル [] 参照
モデルファイル [] 参照

shinyMIPHA Server [https://adachi-lab.shinyapps.io/shinyMIPHA-NagoyaU/] 一括設定

解析結果は、C:\MIPHA_VB\result\DP300 に保存されます。

shinyMIPHA

Mathematically important image analysis and various machine learning modules

The screenshot displays the shinyMIPHA web application interface. The main title is "Train ANN model and Prediction". The interface is divided into several sections:

- Choose CSV for training:** Includes a "Browse..." button and a file named "DPsample.csv". An "Upload complete" message is shown below.
- Choose CSV for predicting:** Includes a "Browse..." button and the text "No file selected".
- Choose ANN model(obj):** Includes a "Browse..." button and the text "No file selected".
- Display:** Radio buttons for "Head" (selected) and "All".
- Fraction of train data,(0.9):** A slider set to 0.9.
- set.seed,(123):** Radio buttons for "set.seed(1)", "set.seed(123)" (selected), and "set.seed(300)".
- Input variables, (1-7):** A slider set to 7.
- Output variables, (8-9):** A slider set to 9.
- No.node,(5):** A slider set to 5.
- Decay,(0.01):** A slider set to 0.01.

Navigation tabs include: Data, Best parameter, Graph(scaled) (selected), Sensitive analysis, network, Predict, Manual.

Buttons: "Train" (highlighted in a yellow box), "download ANN model(obj)".

Text: "Before click, please make sure input/output variables".

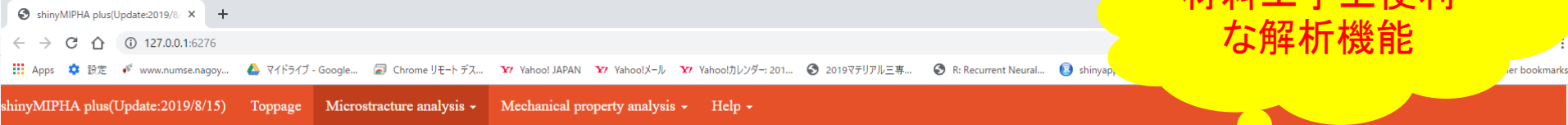
ANN-estimated vs observed plot: A scatter plot showing the relationship between observed values (x-axis, -2 to 2) and ANN-estimated values (y-axis, -2 to 2). The plot includes a dashed diagonal line representing y=x. Data points are categorized as "train" (open circles) and "test" (open triangles). A text box in the upper left of the plot provides the following statistics:
RMSE(train)=0.0707
RMSE(test)=0.2346
coefficient(train)=0.9975
coefficient(test)=0.9744

Yellow callout bubble: Contains the Japanese text "選ぶだけで最先端の機械学習" (Machine learning that is just about choosing).

shinyMIPHA plus

Metallurgically useful analysis

材料工学上便利
な解析機能



Deviation from KS/NW orientation relationship

Observed ND of FCC, (1,1,3)
1,1,3

Observed RD of FCC, (1,-1,0)
1,-1,0

Observed ND of BCC, (1,2,0)
1,2,0

Observed RD of BCC, (-2,1,1)
-2,1,1

KS OR: {111}<-1-10>fcc//{110}<-1-11>bcc

NW OR: {111}<-12-1>fcc//{110}<-110>bcc

Parallel plane of FCC, (-1,-1,1)
-1,-1,1

Parallel direction of FCC, (1,-1,0)
1,-1,0

Parallel plane of BCC, (0,-1,-1)
0,-1,-1

Parallel direction of BCC, (1,-1,1)
1,-1,1

Analysis

Stereographic projection(FCC,BCC)

overplot,(yes)
 yes
 no

plot size,(0.7)
0.1 0.7 2

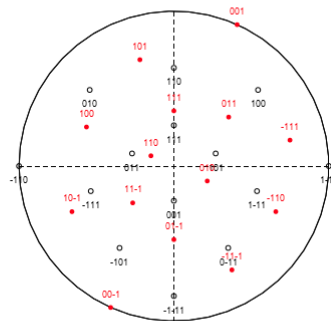
text size,(0.7)
0.1 0.7 2

index range,(1)
1 5

indexPS1,(-8)
-3 10

indexPS2,(8)
-10 8 10

[1] "ND1=c(1, 1, 3) ,RD1=c(1, -1, 0) ,ND2=c(1, 2, 0) ,RD2=c(-2, 1, 1)"



Deviation angle(degree) from plane/direction parallel
[1] "66.52/118.13"

Deviation angle(degree) from KS relationship
[1] 27.98

Rotation axis(u,v,w)
[1] 0.9365474 0.2753013 -0.216

Quantitative image analysis by **MIPHA**

材料工学的に重要な特徴量抽出に特徴

		2D	3D
形態 評価	粒子数	✓	✓
	面積	✓	
	真円度/真球度	✓	✓
	凸度	✓	
	長さ	✓	✓
	フェレ径	✓	✓
	フラクタル次元	✓	✓
	体積		✓
	表面積		✓
	ガウス・平均曲率		✓
	連結性 (Genus)		✓
	連結性 (Euler-Poincare)		✓
	分岐点数		✓
画像 処理	機械学習型画像処理(Trainable WEKA segmentation)	✓	✓

Quantitative image analysis by [shinyMIPHA](#)

数学・画像工学的に重要な特徴量抽出に特徴

	解析項目	2D	3D
形態 評価	粒径解析: 平均・最大・分散	✓	
	方向解析: 水平・垂直・45度成分	✓	
	Hough変換: 直線・円検出	✓	
	粒子数	✓	
	パーシステントホモロジー: 潜在的連結性	✓	✓
	二点相関関数: 粒子空間分布	✓	
	高速フーリエ変換(FFT) *plus	✓	
輝度 値評 価	輝度値分布解析	✓	
	ROI平均輝度値・平均方向解析	✓	
その他	自己相関関数	✓	
	類似性解析(相互相関関数・相互情報量)	✓	
	一般的な画像処理(二値化、コントラスト均一化・強調、ぼかし、シャープ、クロップ、回転、フリーハンド描写)	✓	

* plus: shinyMIPHA_plusに実装

Machine learning by [MIPHA](#) & [shinyMIPHA](#)(1/2)

		MIPHA	shinyMIPHA
Sparse modelling	AIC/BIC/Lasso		✓
	Glasso		✓
	PCA		✓
	Kernel PCA		✓
	Autoencoder		✓
Clustering	K-means		✓
	SOM		✓
Direct analysis	Regression analysis		✓
	Generalized linear mixed-effects model		✓
	Gaussian process regression		✓
	Artificial neural network(ANN)	✓	✓
	Support vector regression(SVR)		✓
	Recurrent neural network		✓
Inverse analysis	ANN-genetic algorism	✓	✓
	ANN-particle swarm optimization		✓

Machine learning by [MIPHA](#) & [shinyMIPHA](#)(2/2)

		MIPHA	shinyMIPHA
Inverse analysis	ANN-Bayesian optimization		✓
	SVR-Bayesian optimization		✓
	Random forest-Bayesian optimization		✓
Crystallography *plus	Stereographic projection		✓
	Deviation from orientation relationship		✓
	Schmid factor		✓
Else	Create 2D/3D random data		✓
	Create dataset		✓
	Select variables		✓
	Random sampling		✓
	Calculate mean/std		✓
	Bind CSV file		✓
	2D/3D plot		✓
	Histogram		✓

Metallurgical analysis by shinyMIPHA plus

		shinyMIPHA plus
Microstructural analysis	Fast Fourier Transform(FFT)	✓
	Stereographic projection	✓
	Deviation from OR	✓
	Schmid factor	✓
	Modified JMAK eq.	✓
	Histogram peak fitting	✓
	(Spectrum peak fitting)	Under construction
Mechanical property analysis	SS curve by swift eq.	✓
	(Secant method)	Under construction