

研究部会紹介

マテリアルズ・インフォマティクス研究部会

The sectional meeting on materials informatics

杉尾 健次郎

Kenjiro SUGIO

1. 研究部会設立の背景

近年、マテリアルズ・インフォマティクスが材料科学分野における第4のパラダイムとして注目されている。1600年頃までは科学は純粋に経験的であり、実験的観察により研究が進められてきた（第1のパラダイム）。そして、それ以降、ニュートン力学に代表される数学的方程式の形で理論モデルに一般化する第2のパラダイムが登場した。しかし、多くの科学的問題に対しての理論モデルは複雑になりすぎ、解析的な解決策は実現困難となっていった。そして、1900年中頃のコンピュータの出現により計算科学による第3のパラダイムが普及した。これにより、第2パラダイムの理論モデルに基づいた複雑な実世界の現象をシミュレーションすることが可能となった。そして今日、ほとんどすべての科学分野において実験、理論および計算をツールとしてそれらを用いて研究することが一般的になってきている。これらの実験やシミュレーションによって生成されるデータの量は、ここ数年飛躍的に増加しており、科学の第4のパラダイム、つまりデータ駆動科学を生み出した。これにより実験、理論および計算の3パラダイムを統合することが可能となってきた。

本研究部会では図1に示すようなデータベースを中心としたプロセス・材料組織・材料特性の相互の関係性を機械学習により分析するシステムの検討および開発を行い、これらの技術を軽金属材料の研究・開発に適用することを目指す。活動内容は以下に示す通りである。

- (1) データを収集してデータベースを構築するためのシステムについての検討およびソフトウェア開発
- (2) データを大量（自動的）に取得するシステムの検討

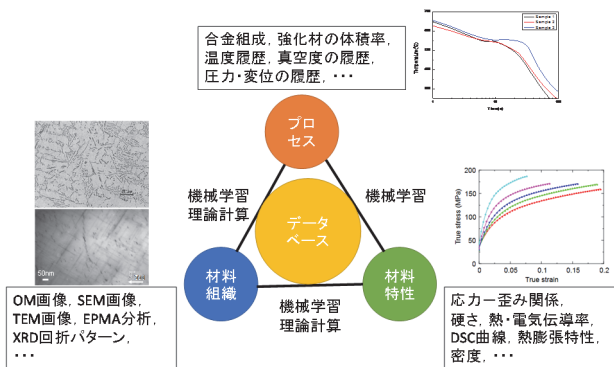


図1 プロセス・材料組織・材料特性の相互の関係性を機械学習により分析するシステム

(3) データの相互関係を機械学習によって分析する手法の検討およびソフトウェア開発

(4) マテリアルズ・インフォマティクスを用いた研究事例についての情報交換

2. 部会構成

令和5年2月現在の委員構成を表1に示す。委員は、学側から6名、産側から9名、官側から2名、合計17名により構成されている。本研究部会は令和2年4月よりスタートし、年3回程度で会議を開催している。部会発足当初から新型コロナウイルス感染症の拡大のため研究部会はオンラインで行われている。

3. 活動内容

第1回研究部会（2020年4月27日 Web開催）

- ① メンバーの紹介
- ② 活動内容について

第2回研究部会（2020年9月28日 Web開催）

- ① 新メンバーの紹介
- ② 研究事例の紹介1 大阪公立大学 上杉徳照
「Mg合金の金属組織画像におけるCNNを用いたEnd-to-Endな結晶粒径の自動測定」

表1 マテリアルズ・インフォマティクス研究部会の構成委員
(令和5年2月現在, 順不同)

氏名	所属	備考
杉尾健次郎	広島大学	部会長
佐々木 元	広島大学	
松本 洋明	香川大学	
田中 康弘	香川大学	
上杉 徳照	大阪公立大学	
永瀬 丈嗣	兵庫県立大学	
田畑 潤二	広島アルミニウム工業株式会社	副部会長
木戸 友博	広島アルミニウム工業株式会社	
濱本 修司	広島アルミニウム工業株式会社	
織田 和宏	日本軽金属株式会社	
片山 亮	株式会社神戸製鋼所	
林 良和	三協立山株式会社	
土肥 正芳	三協立山株式会社	
愛須 優輝	株式会社UACJ	
平田 智丈	大阪産業技術研究所	
田中 努	大阪産業技術研究所	
兒山 友香	株式会社シマノ	

- ③ 研究事例の紹介2 広島大学 杉尾健次郎
「機械学習を用いたアルミニウム合金の組織判別」
 - ④ 今後の活動について
- 第3回研究部会 (2021年1月7日 Web開催)
- ① 今後の活動について (アンケートに基づいて)
 - ② Webアプリケーションの開発状況と使用方法についての説明
- 第4回研究部会 (2021年4月26日 Web開催)
- ① 今後の活動について
 - ② Webアプリケーションの開発状況と使用方法についての説明
- 第5回研究部会 (2022年1月24日 Web開催)
- ① 今後の活動について
 - ② Webアプリケーションの開発状況と使用方法についての説明

4. これまでの成果

図2に示すようなWebアプリケーションサーバーを中心として実験・シミュレーションデータを集約できるシステムを構築するためのソフトウェア群の開発を行った。また、研究部会内での研究協力が容易となるように、外部サーバーでのWebアプリケーションの運用を開始した。外部サーバーにはドメイン名 (www.materinfo.org) を取得し、また、暗号化されたhttps (Hypertext Transfer Protocol Secure) での通信のみを許可している。

ここで、Webアプリケーションサーバーで運用するソフトウェア (MaterInfo) の詳細を示す。WebアプリケーションのフレームワークとしてPythonで開発が可能なDjangoを用いた。また、画像処理にはOpenCV、データ処理にはPandas、機械学習にはscikit-learnを用いた。実験より得られたプロセス・材料組織・材料特性の生データおよびシミュレーションにより得られた計算結果を順次サーバー上にアップロードすることによりデータベースを構築することができる。このシステムではデータのアップロード時に、プロジェクト名、作成者、試料名、日時、測定装置およびコメント等を同時に記録するため、試料名を指定して検索するだけで、その試料に関するすべての生データの閲覧が可能である。

機械学習を用いてプロセス・材料組織・材料特性データの

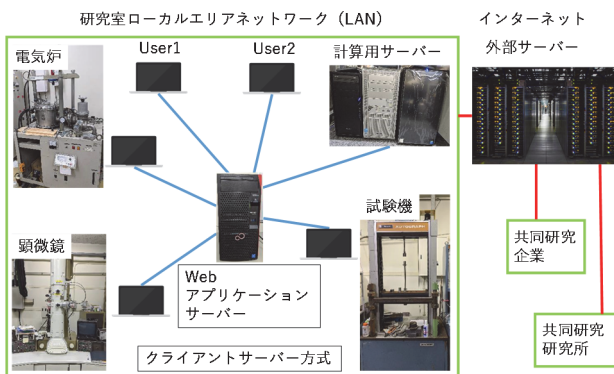


図2 クライアントサーバ方式によるプロセス・材料組織・材料特性の生データおよびシミュレーションデータの収集

表2 Webアプリケーション (MaterInfo) で使用できる特徴量

プロセス	母材の組成, 温度, 圧力
材料組織	等価円直径, 長辺および短辺の長さ, アスペクト比, 円形度, 角度, 2次元局所粒数, 画像の平均自由行程
材料特性	硬さ, 密度, 耐力, 強度, 伸び, 加工硬化率, 局所伸び

関係性を分析するためには、生データから二次データ (特徴量) を抽出しなければならない。また、これらは生データの内容およびフォーマットに合わせる必要がある。例えば、生データがOM画像またはSEM画像等の画像データの場合、色調補正、フィルタ処理、二値化処理、ノイズ除去、輪郭抽出等の画像処理を組合わせて第二相の面積率、数密度、真円度、等価円直径、アスペクト比、長辺・短辺長さ等の二次データを抽出する。この時、最適に二次データを抽出できるように、画像処理パラメーターの調整機能が必要である。また、調整した画像処理パラメーターをデータベースに記録して、類似の画像データに対して再利用する必要がある。同様に、その他の生データに対しても二次データを抽出する必要がある。表2に現在Webアプリケーションサーバーで使用できる特徴量を示す。今後、使用できる特徴量を順次増やしていく予定である。

生データから抽出した複数の二次データ (特徴量) を分類、回帰、クラスタリングまたは次元削減等の機械学習の手法によって分析する。ここで、与えられた特徴量がどのクラスに属するかを判別するのが分類問題であり、さらにその分類するクラスが増えれば回帰と考えることができる。データが十分に蓄積されれば、例えば、プロセスの特徴量から材料特性を、逆に材料特性の特徴量からプロセスを予測することが可能となる。

Webアプリケーションサーバーと連携してネットワークを介して生データの取得および計算用サーバーへの計算ジョブの投入が可能となるソフトウェア (MaterInfoDevs) の開発を行った。放電焼結機および熱膨張測定装置に取り付けたラズベリーパイ等のサーバーにMaterInfoDevsをインストールすることにより、Webアプリケーションからの計測が可能となっている。また、既存の計算用サーバーにMaterInfoDevsをインストールすることにより、熱伝導計算および第一原理計算のジョブ投入が可能となっている。

現在、広島アルミニウム工業株式会社および香川大学が本システムを本格的に使用している。また、その他の部会メンバーも試用を行っており、将来的な使用の検討をしている。

5. 今後の活動予定

Webアプリケーションのサーバーサイドアプリおよびクライアントサイドアプリの更なる機能拡張を行う。また、より多くの部会メンバーに本システムを使用いただけるようマニュアル等の整備を進める。さらに、機械学習を使用した (本システムの使用を含む) 研究事例についての情報交換を行う。