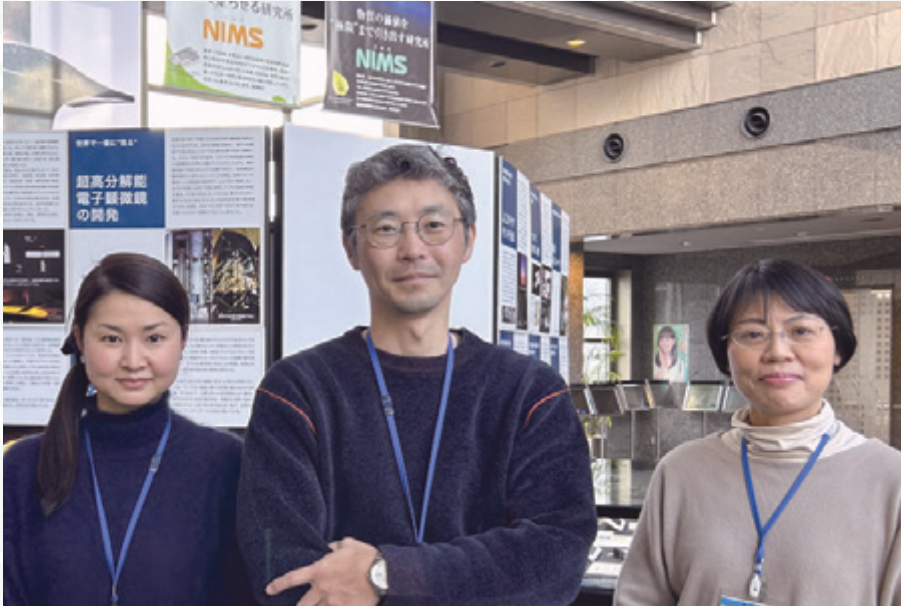
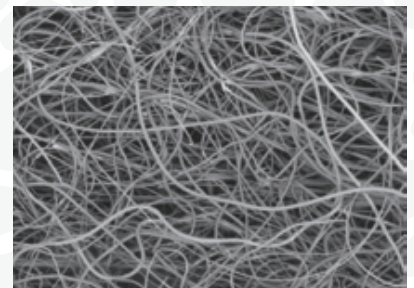
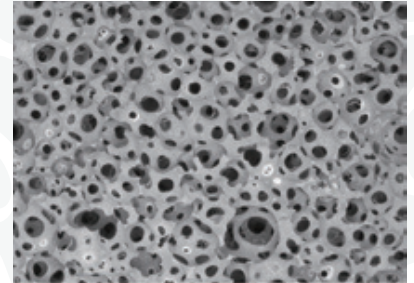


物質・材料研究機構 様



左から大庭美和様、佐光貞樹先生、筈谷美佐様



材料が持つ3次元構造を可視化することで 多くの計測値や情報が得られます！

高分子・バイオ材料研究センター データ駆動高分子設計グループの佐光貞樹先生は、相分離法や結晶化による多孔質高分子材料の製造開発に取り組まれています。

様々な材料分析手法で細孔やネットワークの構造解析を行う中で、SEM観察やX線CTにより可視化して解析されており、画像解析ツールの一つとして画像解析ソフトウェアMIPAR(マイパー)をご利用頂いております。

今回、実際にMIPARで解析処理を行って頂いている同グループ研究業務員の大庭美和様と、2D画像からの3D構築に携わっていらっしゃる同じく研究業務員の筈谷美佐様とご一緒に、お話を聞かせて頂きました。

質問：ご研究の内容を教えてください。

佐光様：材料科学の研究で、これまで人間の感覚に頼っていたものをデジタルツールに移行する手法を模索し、定量的に数値として見える化していく研究を進めています。

PCの中で完結する材料シミュレーションの結果解析や数値化は現状でもずいぶん進んでいるのですが、実際に材料を試作し、内部の材料構造を定量的なデジタルデータにする評価手法はまだ確立されていません。

扱う材料毎に手探りのテストが必要になりますので、その仕組み構築には大変な労力が伴います。

世の中で利用が進んでいるAI技術では、既に得られているビッグデータを処理能力の高いコンピュータで自動解析することで

精度の高い分類・分析・予測・検知を可能にしていますが、材料分野のAI技術であるMI(マテリアルインフォマティクス)では、研究者が1つずつデータを文献から収集するか、実験で取得していることが多くあります。

MIに用いるデータセットの構築には実験方法などノウハウが必要になりますが、高分子材料に限らず、材料の3次元構造に関するデータベースは私の知る限り世界にも存在しません。

質問：どのような材料を研究されているのでしょうか？

佐光様：我々が研究している多孔質材料(多孔体)は、マテリアルでできた骨格の間に空隙(細孔)を持つ材料です。細孔の効果により、軽量・衝撃吸収・物質透過・断熱・吸着といったバルク材料

とは異なる機能が現れます。多孔体には「素材」・「材料形状」・「多孔構造」という3つの材料因子があり、その組合せで多彩な材料性能を実現できます。

素材産業の中では、金属・セラミックス・カーボン・プラスチック・ゴム・複合材料といったあらゆる素材で多孔体が上市されています。

軽量かつ柔軟で多彩な加工プロセスを使える高分子素材は多孔体に適しており、高分子でできた多孔体(高分子多孔体)は、発泡体・焼結体・膜・フィルム・不織布・粒子として多くの産業分野に提供され、おのずと市場規模も大きくなります。

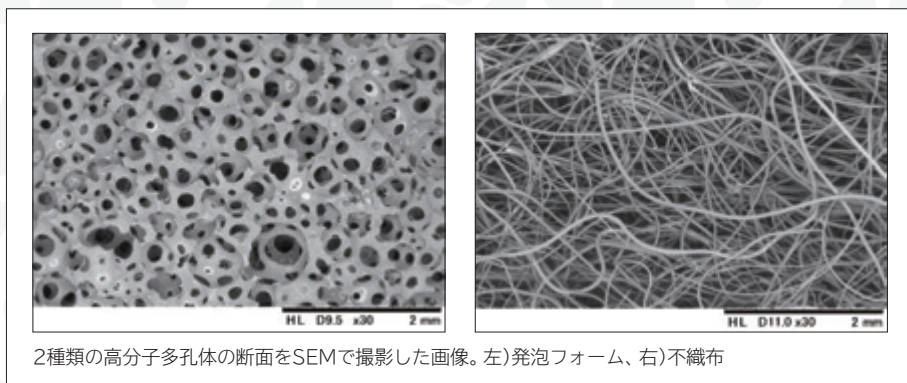
実際に、化粧パフ、断熱フォームといった日用品を始め、リチウムイオン電池用セパレーター・水処理や医療用のろ過膜・ガスフィルターなど身近な先端機器にも多く使われていますので、私共の研究はその基礎的な根幹を支える重要なものと言っていいでしょう。

質問：ご研究の中で画像解析はどのように利用されていますか？

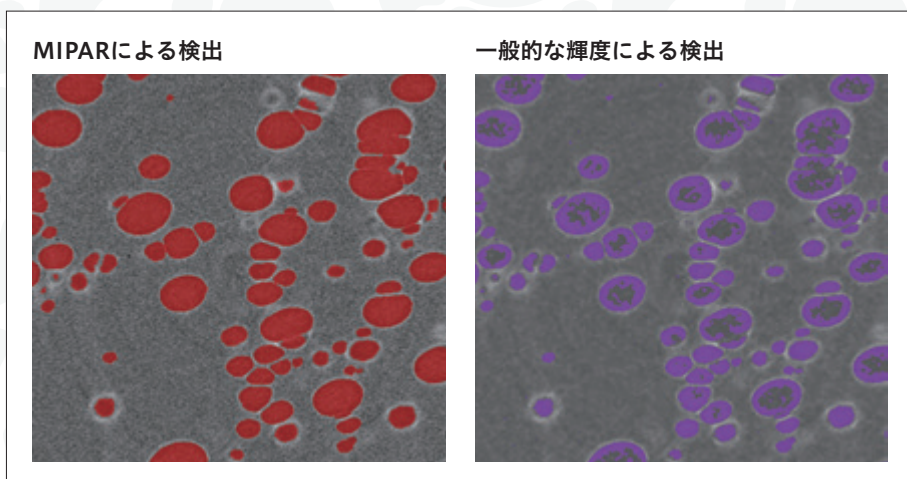
佐光様：高分子内部の微細構造は、結晶のような厳密な空間配置や規則構造を持たないことがほとんどです。

このような不規則な構造は、画像を見たときの人間の感覚では定性的に区別できますが、画像データから計測できる数値だけで構造を的確に表現して分類・区別することは意外に難しいです。

[図1]



[図2]



[図1]の発泡フォームと不織布は、見た目には全く異なる多孔質構造と区別でき、一目で発泡フォームには球状細孔が多数あることが分かり、不織布では繊維径(骨格の太さ)は計測しやすくなっていることがわかります。一方で、発泡フォームで不織布の繊維径に相当する骨格太さを定量化しようとする、人の感覚に頼って手作業で画像計測できそうですが、基準を統一したアルゴリズムの自動処理で抽出するのは困難です。

また、不織布では、空隙のサイズや形状を数値で表現することは難しく、これらの例から分かるように、多孔質構造の数値化や分類・特徴抽出は未だ人間の感覚に頼る部分が多く、データサイエンスに必要な不可欠なデジタル化には課題が多く残っています。こういった、材料構造の特徴を数値として定量化することができれば、構造-特性相関を予測して材料開発を加速するといった、効率的かつ合目的な材料開発につながると期待出来ます。

質問：MIPARのご使用感はいかがですか？

佐光様：我々のテストの中でも、粒子などでは既に良い結果がMIPARによって得られており、下図のように他の手段と比較した場合には、MIPARの優位性が非常に良く表れています。

2D画像で良い検出結果が出せれば、3Dを構築した際にも、おのずと精度の高い信頼性のある結果が得られると思われれます。

例えば、[図2]の画像では、MIPARで空隙を明瞭に検出出来ており、正確な測定や3Dデータ作成に繋がります。

上記では直感的に分かりやすく説明するため、あえて2次元データであるSEM画像を例に出しましたが、実は2次元画像と3次元画像には含まれる情報量でも解析手法でも質的な違いがあります。

3次元画像は、2次元画像には反映できない構造の異方性・構造の連結性に関する正確かつ豊富な情報を有しています。例えば、球のように等方的な構造であればどの断面で見ても同じ断面形状になりますが、異方性のある繊維のような構造だと、見る方向によって形状が大きく異なります。

2次元画像には構造の連結(つながり方)に関する情報が含まれていないため、2次元断面ではつながっていないように見えても、別の断面では構造がつながっている可能性があります。

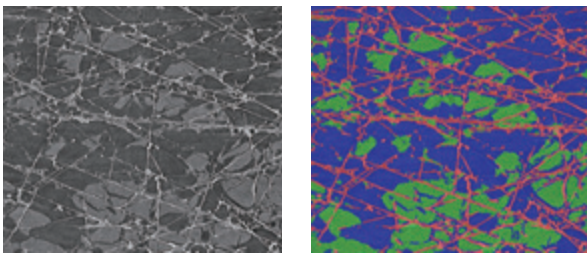
3次元構造を可視化し、そのデータが内包する構造情報を引き出して材料特性の向上と背景に隠れた機構の解明と理解につなげることで、材料開発の加

速と材料科学の理解が深まると確信しています。

今回のMIPARでのテストでは、[図3]のように空隙やファイバ、バインダーと呼ばれる3種類の構造をもつ材料に対して、CT画像を撮像し、画像処理によって、そこから得られる構造的な割合などを得ることが求められていました。

輝度情報だけでは色分けが難しい画像データに対して、Deep Learning機能では形状の違いを反映して色塗りができ、手順を大幅に簡略化出来ることがポイントだと考えています。

[図3]

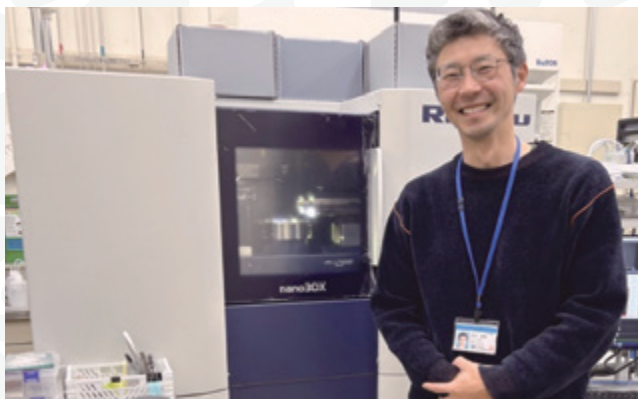


ファイバ、バインダー画像でのMIPAR処理画像

Deep Learningオプションで学習させたモデルを使った場合でも自動化できるか、または、いかに手編集の作業量を低減できるか、が画像処理を成功させるカギになってくると思います。

質問：CT装置を拝見してもよろしいですか？

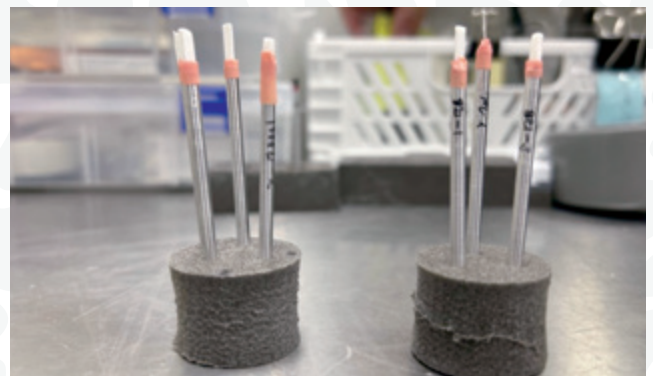
佐光様：こちらです。撮像の段階で、後段の画像解析に適した画像を上手に取得することが、とても大切です。



筈谷様：まず装置を使いこなす事が大切なのですが、研究のプロセスを知らないと、どのような撮像が良いのかわかりませんので、解析の全体像を把握して作業を進めることがとても重要です。実際のデータは、サンプルデータのように単純な構造ではないことが多いので、どんなデータであれば解析がしやすいか、いつも模索しています。今回の例の一つでは、ファイバ状の対象を検出するのに、どのような形状のサンプルをどのような条件で撮影するかなど、次の解析で求められることを意識して作業をしています。また、撮像プロセス・画像解析の自動化を進めたいとも



実験室には様々な装置やノウハウが詰まっている様子



CT装置で断面スキャンする材料（棒の先端部）

考えておまして、自動化プログラムを作成するためにPythonの習得にも頑張っています。

質問：確かに、撮像が理想的でない、いかに画像処理で頑張っても得られるものは限られてしまいそうですね。MIPARでの作業で気になる点はありますか？

大庭様：他のソフトウェアに比べても、MIPARは優秀で使いやすいと思います。対象の形状を識別するには、独自の検出アルゴリズムをメニューから選択して簡単に作れるので、撮像状況に合わせた精度の高い検出が出来ます。複数の画像を処理するバッチ処理機能までも標準搭載していますので、一般的なソフトウェアでありがちな、解析内容によってモジュールやオプションの追加を必要としないところが、安心して使える一つの点だと思います。また、今回のケースでは従来の画像処理手法では検出が難しかったため、Deep Learningによる検出を様々試験していますが、単純に学習量を増やせば検出の精度や信頼度が上がるかというところでもない事例がいくつか発生しました。Deep Learningの有効性は確認できたので、まずは引き続き自動化の確立に向けて進めていきたいと考えています。

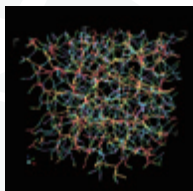
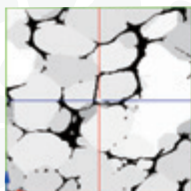
佐光様：人間の感覚に頼るとデータの取り方に偏りが生じることが多く、誤った結論になることもあるので、実験計画法などを使ってまんべんなくデータをとれるようにしています。画像解析や3D構築をさらに自動化することで、人間のバイアスを除いていけるような解析につなげていきたいと思っています。

質問：3次元で画像処理されたものを見せてもらえますか？

佐光様：現在は他のソフトウェアを使って次のような3D結果を導いていきます。



繋がった細孔を分割して大きさや形状を解析



細孔でできた3次元の経路をネットワークとして可視化

MIPARにも同様なことができる3D構築機能がありますのでぜひお試しください。

質問：今後、MIPARに期待するところをお聞かせください。

佐光様：MIPARは、操作GUIやマニュアルが英語なので、最初

に試すときにはそれぞれのボタンをどう使うか迷うところがありました。

日本語の説明書は、操作のポイントごとにはご用意しているので、何とか理解できていますが、もう少し解析の流れに沿った説明を対象ごとに増やして頂ければ嬉しいです。

どんなソフトもそうだけど機能がいっぱいありすぎて困る。とりあえずこの機能を使ってみて！これがお勧め！！という情報があると、とつきやすくなると思います。

現在は、ライトストーンをサポートを介してMIPAR開発元と連絡しており助かっていますが、ぜひ開発元の担当者とも話ができる機会があるとうれしいです。

貴重なご意見有難うございます。英語メニューのままでも簡単にご利用頂けるように、日本語でのご案内資料やウェビナーをさらに強化して行きます！

ご期待にお応えできるようにMIPAR開発元と一緒に今後も頑張ります！

本日は貴重なお時間を頂きまして、有難うございました。

佐光 貞樹 (SAMITSU Sadaki) 先生

物質・材料研究機構 高分子・バイオ材料研究センター
高分子材料分野 データ駆動高分子設計グループ 主幹研究員

早稲田大学 大学院 先進理工学研究科 ナノ理工学専攻 教授(任期制)

データ駆動高分子設計グループ様のWebページはこちらです：
https://www.nims.go.jp/group/Data-driven_Polymer_Design/index.html

委員歴

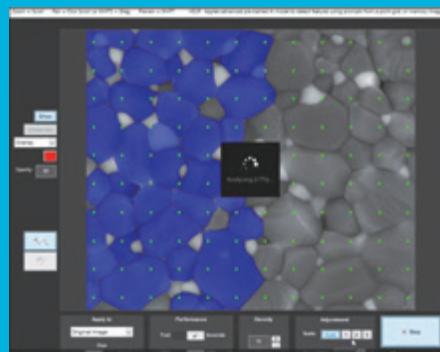
2020年4月～現在 公益財団法人 高分子学会、基礎物性研究会委員
2020年6月～2022年6月 公益財団法人 高分子学会、行事委員会委員
2022年7月～2023年6月 内閣府 科学・技術イノベーション推進事務局、行政実務研修
2023年7月～現在 公益財団法人 高分子学会、編集委員会委員

受賞履歴

- ・文部科学大臣表彰若手科学者賞 (2015)
- ・NIMS理事長進歩賞 (2015)
- ・第24回ポリマー材料フォーラム優秀発表賞 (2016)
- ・第63回高分子研究発表会 ヤングサイエンティスト講演賞 (2017)

MIPAR新オプション Spotlightが登場!!

学習を一切必要としない革命的な自動AI検出機能です。
自動で対象個所をピックアップ、ぜひお試しください。



創業30年の経験と実績でお客様をサポートします。

正規国内代理店

 LightStone®
株式会社 ライトストーン

 Ubiquitous AI
Group Company

〒101-0031 東京都千代田区東神田2-5-12 龍角散ビル7F
TEL: 03-3864-5211 E-mail: sales@lightstone.co.jp
<https://www.lightstone.co.jp/>

