**マテリアル工学実験　　　　　　　　　 　16　班**

実　験　報　告　書

**題　目B1.機械学習を用いた金属材料の組織解析と物性評価**

**実 験 実 施 日 　　　 　　　(西暦)　　　　2025年　　6月　　24日**

**提 出 日　　 　 　　　(西暦)　　　　2025年　　6月　30日**

**(再 提 出 日　 　　　　(西暦)　　　　年　　月　　日)**

**報告書作成者**

**学籍番号　　　　　8223036　　　　　　　　氏名　　　　　　　栗山淳**

**共同実験者**

**学籍番号　　　　8223043　　 　氏名　　　　　　小山天河**

**学籍番号　　　　8223096　 　　氏名　　　　　　松山航**

**学籍番号　　　　8223004　 　　氏名　　　　　　天野怜**

**学籍番号　　　　8223078 　 　氏名　　　　　　南茂結衣**

**学籍番号　　　　　　　　　　　氏名**

**東 京 理 科 大 学 先 進 工 学 部 マ テ リ ア ル 創 成 工 学 科**

|  |  |
| --- | --- |
| **実験指導者記入欄** | |
| **提　 出　 日　　/** | **署名** |
| **再提出指定日　　/** |  |
| **再 提 出 日　　 /** | **署名** |

**チェックリスト**

☑「結論」が的確にまとめられているか。

☑「結論」の長さは適切か。日本語に誤りがないか(論旨，文法，単語)。

☑「結論」と「実験結果」の整合性がとれているか。

☑「結論」を導くために必要十分かつ適切な「実験結果」の表現が過不足なくされているか。

☑「実験結果」はわかりやすく，見やすく，正確に表現されているか。

☑ グラフの軸，表の項目，グラフや表のタイトルに漏れはないか，適切か。

☑ 有効数字は適切か。単位が漏れていないか。

☑（写真を用いる場合）写真の明るさやコントラストは適切か。

☑「実験結果」を得るために必要な「方法」が過不足なく表現されているか。

☑「目的」が明記されているか。「目的」と「結論」の整合性がとれているか。日本語が適切か。

☑「なぜこの目的で実験をしたか」が「背景」に的確に表現されているか。日本語が適切か。

☑ 必要に応じて適切に参考文献の引用情報が記述されているか。

参考文献：議論の裏付けを与えるものであるから，実験題目に関係がある文献を偏りがないようにできる限り引用する。文献の表記方法を参考として下記に記述しておく。

1) 著者名，書籍名，発行所，ページ，発行年

2) 著者名，雑誌名，巻，号，ページ，発行年

☑ 全体としてわかりやすいか。

☑「背景」が１ページを超えていないか。

☑「実験方法」が１ページを超えていないか。

☑「結論」が100字程度で記されているか。

-1-

1．背景・目的

近年、人工知能（AI）技術の急速な進展により、さまざまな分野でデータを活用した効率的な解析・設計が実現しつつある。とくに、材料開発の分野では、従来の「経験と試行錯誤」による設計アプローチから、「データ駆動型」のアプローチへと大きく舵が切られている。この新しい手法は「マテリアルズ・インフォマティクス（Materials Informatics：以下、MI）」と呼ばれ、近年の材料工学における革新的な研究手法のひとつである。MIとは、材料の組成、加工条件、構造、物性などの多次元データを収集・統合し、機械学習や統計的手法を用いて有用な知見や予測モデルを導き出すことで、材料開発のスピードと効率を飛躍的に高める技術である。MIの応用は幅広く、合金やセラミックス、高分子材料に至るまでさまざまな材料に対して研究が進んでいる。とくに近年注目されているのが、「微細組織」と「材料特性」の関係性をデータとして扱い、機械学習でモデル化・予測するという手法である。たとえば、金属材料においては、焼なましや冷間加工といった熱・機械処理の条件によって、材料内部に形成される結晶粒の大きさ、形状、配向（テクスチャ）、析出物の分布、双晶、転位密度などの微細組織が大きく変化する。これらの組織は、引張強さ、降伏応力、延性、疲労強度といった力学特性に密接に関係しており、適切に設計・制御することで、目的に合った性能をもつ材料を得ることができる。しかし、こうした微細組織は非常に複雑で、かつ高次元な情報を含んでおり、人間の目視や直感による評価には限界がある。従来の金属組織解析では、光学顕微鏡や電子顕微鏡で観察した画像を専門家が分類・評価していたが、これは時間がかかるうえ、評価者によって結果がばらつくといった問題があった。そこで登場したのが、画像認識を活用した機械学習による解析である。近年は、画像からテクスチャ情報や粒径分布を自動的に数値化し、それらを機械学習モデルに入力することで、特性の定量的予測が可能になってきている。これにより、熟練の経験に頼らずとも、材料設計に必要な組織−物性関係を高精度に解析できる可能性が広がっている。さらに、近年は深層学習（ディープラーニング）を含む画像解析技術の進歩により、従来では識別が難しかった微細な組織差を判別したり、材料の製造履歴までを推定する研究も進んでいる。実際に、鉄鋼材料やアルミニウム合金などの構造材料において、引張特性や耐摩耗性、加工硬化特性の予測が可能となってきており、研究成果は産業応用にも広がりつつある（大山陽介，2020）。このように、金属材料の微細構造情報を定量的に捉え、それを活用して材料特性を予測するというアプローチは、材料研究の在り方そのものを変える大きな転換点にあると言える。このような社会的・学術的背景のもと、本実験では、金属組織の観察画像から得られる微細構造情報を定量化し、機械学習を用いて力学特性を予測するという一連のプロセスを実践的に学ぶ。実験では、複数の金属試料において画像データと引張特性データを用意し、特徴量（たとえば粒径分布、黒鉛球の数やサイズなど）を画像処理を通じて抽出し、それを回帰分析や分類などの機械学習モデルに入力する。これにより、試料の力学的性質を非破壊で予測する可能性や、加工条件と組織の関係などを見いだすことができる。

このような一連の作業を通じて、材料の組織−物性関係を統計的かつ定量的に理解する能力を養うだけでなく、データ駆動型材料設計の考え方とその意義を実感することができる。本実験の目的は、金属組織画像から得られる定量情報をもとに機械学習を適用し、微細構造と材料特性の関係を解析することで、MI的アプローチが材料設計・開発に有効であることを理解し、今後の先進的な材料開発における可能性を体験的に学ぶことである。

2．原理

2.1　フェーズフィールド法

　フェーズフィールド法は，界面の明示的な追跡を必要とせず，層変態や微細組織の真かなどの現象を連続場として記述できる数値解析手法である。この方法では，フェーズフィールド変数と呼ばれる連続的な変数を用いて，材料の各領域の状態を表す。例えば，，を相A，を相Bとし，その中間の値が界面を意味するように設計することで，相境界を自然に表現できる。フェーズフィールド法では，まず系の自由エネルギー汎関数を定義し，一般には下の式のような形をとる。

この式は，局所的な自由エネルギー密度に加えて，空間的な変化を表す勾配項を含み，は界面エネルギーに関係する係数である。このようなエネルギー汎関数に基づいて形の時間発展を導くとき，変数が保存される場合には，Cahn-Hilliard方程式が用いられる。これは化学ポテンシャルを用いて，以下のような形をとる。

ここでは移動度を示す。Cahn-Hilliard方程式は，相分離過程や微細組織の発達を記述する際に広く用いられており，フェーズフィールド法の中心的な役割を担っている。

2.2　機械学習

　機械学習とは，与えられたデータから規則性や関係性を自動的に学習し，未知のデータに対して予測や分類を行う手法である。人間があらかじめルールを明示的に定義するのではなく，コンピュータが大量のデータを基に経験的にルールを獲得していく点が特徴である。特に，材料k額における機械学習は，組成や微細構造，加工条件といった多変量データと，強度・導電性，熱伝導率などの物性値との関係を統計的にモデル化することで，材料特性の予測や新材料の発見を加速する手段として注目されている。

機械学習の基本的な枠組みでは，入力(説明変数)と出力(目的変数)の関係を学ぶ「教師あり学習」が広く使われている。例えば金属材料の組織画像から流刑や形状，黒鉛球の数などの特徴量を抽出し，それらを入力として与え，引張強さや硬さなどの物性値を出力とすることで，入力と出力の関係を学習する回帰モデルを構築することができる。このとき，学習されたモデルは，未知の組織画像に対しても物性を推定する予測器として機能する。

学習の際には，誤差(予測と実測の差)を最小するようにモデルのパラメータを調整する。例えば，線形回帰では，パラメータを調整して入力と出力の間の線形関係を最もよく表す直線を求める。一方，より複雑な関係性を扱うために，ランダムフォレスト，サポートベクターマシン(SVM)，ニューラルネットワークといった多様なアルゴリズムが用いられることもある。

本実験においても，金属組織の画像データから特徴量を抽出し，それを基に機械学習によって物性を推定するプロセスを通じて，データ駆動型の材料評価と設計の基礎を理解することに使われている。このように，機械学習の原理は，単なる計算技術にとどまらず，材料開発の新しいパラダイムを支える重要な手法として位置づけられている。

2.2.1　教師なし機械学習

2.2.2　教師あり機械学習

3．方法

4．結果・考察

4.1　教師なし機械学習

4.2　教師あり機械学習

5．結論

6．参考文献