

# 機器學習於材料資訊的應用

## Machine Learning on Material Informatics

---

陳南佑(NAN-YOW CHEN)

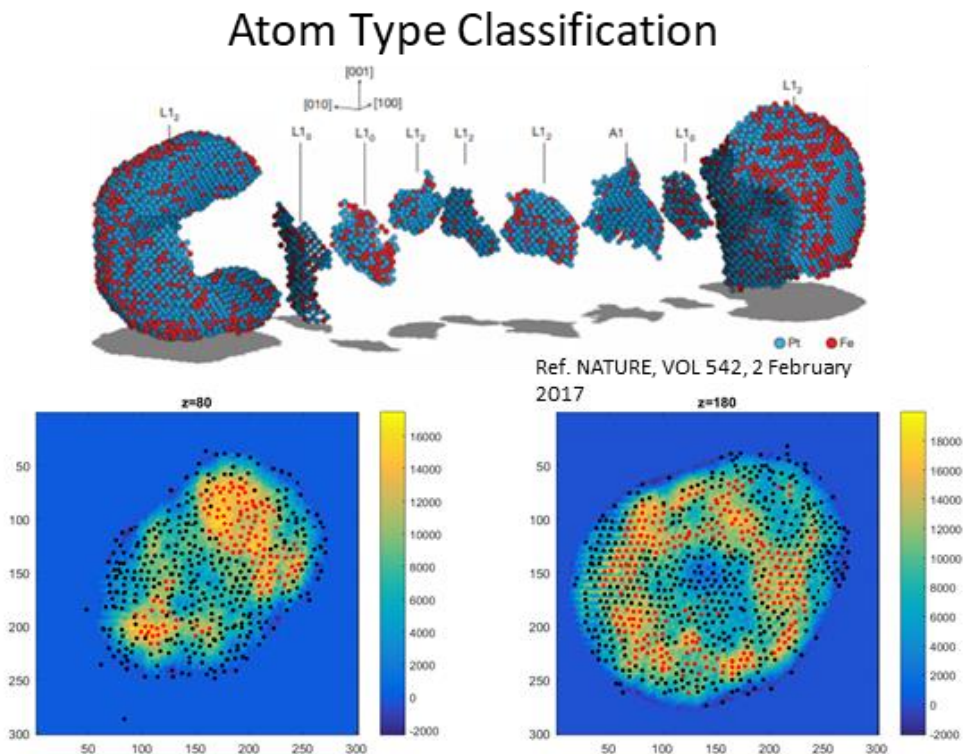
[nanyow@narlabs.org.tw](mailto:nanyow@narlabs.org.tw)

楊安正(AN-CHENG YANG)

[acyang@narlabs.org.tw](mailto:acyang@narlabs.org.tw)

# 奈米粒子影像重建

種類與缺陷型態深度辨識機器



合作計畫

國研院創新計畫

合作團隊

清大工科陳健群實驗室

案例

三維斷層造影之原子種類與缺陷型態辨識

客戶  
目標

透過深度學習技術，定位原子座標、辨識原子種類、分析缺陷型態

問題困  
難描述

需要人工判斷原子種類與缺陷邊界，會因人為偏見造成不一致性的誤判。

訓練資  
料來源

原子級三維斷層造影顯微技術之實驗資料

機器學  
習引擎

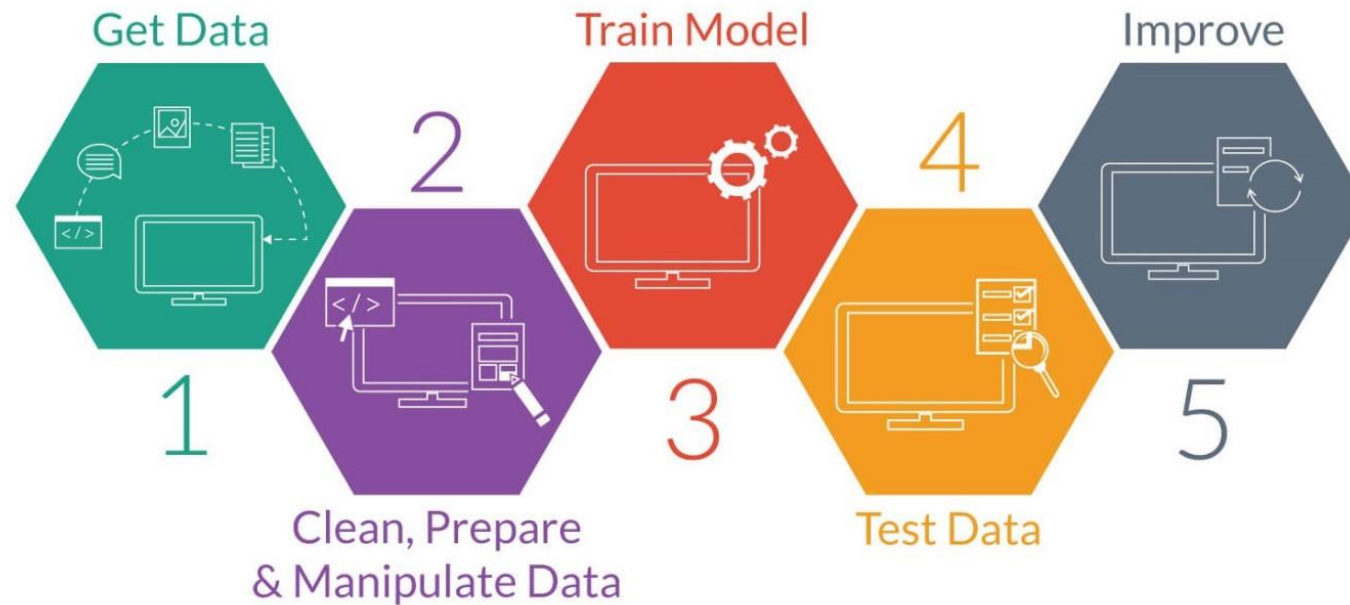
Convolutional Neural Network, Ensemble Learning, Active Learning

結果

成功完成原子座標定位、種類辨識、缺陷邊界型態與相似度分析。降低人為誤判機會。

Status

通過實驗組驗證  
論文撰寫中(Nature Materials)



3D X-ray 影像重建得到影像資料  
(Volume Data)

檔案處理

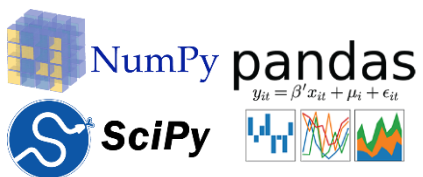
特徵萃取

建立3D CNN  
模型

分類問題

用測試資料  
檢驗演算法

調整萃取特徵  
方法



# 資料說明

	類型	Feature		Label Data
TrainData.mat	raw實驗資料	3D原子座標	訓練模型2000	K-mean 結果
TestData.mat			測試模型	-
dAtomIntensity_TrainData_New.mat	經後處理資料	ROI區域內強度分佈 (7*7*7的voxel範圍)	訓練模型2000	iAtomType_New.mat 人工挑選可信度高的 分類結果進行標記
dAtomIntensity_TestData_New.mat			測試模型23804	-

# 建立網路

每個綠色方塊代表的是multi-channel feature map。

綠色方塊上的數字代表的是channel數量。

x-y-z代表影像本身的尺寸，標記在方塊左側。

不同顏色箭頭代表不同的操作

- 藍色: conv3D 3X3X3 LeakyReLU(0.1)
- 紅色: max pool3D 2X2X2
- 灰色: Flatten
- 紫色: Dropout (0.25)
- 藍綠: LeakyReLU (0.1)+ Dropout (0.5)
- 橘色: softmax

