

# Zastosowanie metod uczenia maszynowego w analizie obrazu mikroskopowego płytek ceramicznych

Dr Arkadiusz Gąsiński, ORCID: 0000-0003-1378-3983; mgr Paulina Tymowicz-Grzyb, ORCID: 0000-0002-1525-3401

Sieć Badawcza Łukasiewicz – Instytut Ceramiki i Materiałów Budowlanych

## Słowa kluczowe

analiza obrazu, uczenie maszynowe, mikroskopia elektronowa

## Keywords

image analysis, machine learning, electron microscopy

## Streszczenie

Współczesne metody badań stosowane w nowoczesnych technikach badawczych spowodowały, że zbierane są ogromne ilości danych, które muszą być poddane dalszej analizie. Uczenie maszynowe pomaga interpretować zgromadzone dane, a po ich przetworzeniu może pomóc podjąć dalsze decyzje. Metoda ta ma coraz większe zastosowanie w kontroli jakości wyrobów. W artykule przedstawiono zastosowanie nadzorowanej wersji uczenia maszynowego w badaniach nad optymalizacją rozpoznawania faz chemicznych z obrazów mikroskopowych i obrazów składu chemicznego dla płytek ceramicznych. Stwierdzono, że w przypadku opracowanych danych z elektronowej mikroskopii skaningowej, najlepsze wyniki uzyskano dla algorytmu CART (drzewo decyzyjne). Zastosowana metodyka znacznie usprawnia przeprowadzenie badań i poprawia jakość uzyskanych analiz obrazu w odniesieniu do standardowego oprogramowania mikroskopów.

## Summary

### Application of machine learning methods in the analysis of the microscopic image of ceramic tiles

Contemporary research methods used in modern research techniques often result in the collection of huge amounts of data that must be further analyzed. Machine learning helps to interpret the collected data, and after their processing, it can help you make further decisions. The article presents the use of the supervised machine learning in research on the optimization of the recognition of chemical phases from microscopic images and chemical composition images for ceramic tiles. It was found that in the case of the developed data from scanning electron microscopy, the best results were obtained for the CART algorithm (decision tree structure). The applied methodology significantly improve the conduct of research and ameliorate the quality of the obtained image analyzes.

Uczenie maszynowe (*machine learning*, ML) jest technologią, w której komputery są uczone wykonywania zadań na podstawie analizy danych zamiast stosowania bezpośrednich instrukcji programowych.

## Wstęp

Uczenie maszynowe znajduje swoje zastosowania w zadaniach klasyfikacji, regresji oraz innych zadaniach związanych z danymi wielowymiarowymi, w których trudno wychwycić skomplikowane zależności (*big data*). Metoda sprawdza się w rozpoznawaniu mowy, obrazu, w bioinformatyce, bezpieczeństwie, przetwarzaniu języka naturalnego. Przykładami zastosowań uczenia maszynowego są: analiza ryzyka kredytowego, przeszukiwanie stron www, analiza opinii, rozpoznawanie twarzy.

Schemat uczenia maszynowego można opisać jako

cel + próbka + algorytm = model

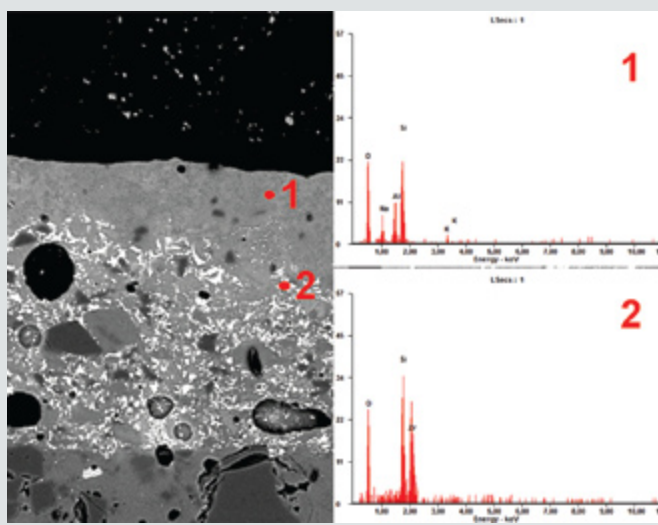
- Cel – zdefiniowany problem do rozwiązania
- Próbka – podzbiór danych wybrany do badań; zawiera oryginalne dane i/lub dane po przetworzeniu (*feature engineering*)
- Algorytmy maszynowego uczenia i optymalizacji – szereg operacji matematycznych wykonywanych na danych

Uczenie maszynowe odgrywa coraz większą rolę w interpretacji danych, również w dziedzinie nauk materiałowych i inżynierii<sup>1, 2, 3</sup>. Technika ta jest zbiorem procedur, które nie

wymagają biegłej znajomości programowania przez użytkownika. Zastosowanie uczenia maszynowego może pozwolić na przyspieszenia odkrywania nowych materiałów poprzez wykorzystanie względnie prostych modeli, które można zastosować do analizy wyników badań lub przewidywania właściwości materiałów. W porównaniu z analizą dokonywaną przez człowieka pozwala ono zaoszczędzić czas na projektowanie nowych materiałów oraz zwiększyć efektywność i dokładność analizy wyników badań. Dwa podstawowe typy uczenia maszynowego to uczenie nadzorowane i nienadzorowane (rys. 1).



Rys 1. Podstawowe rodzaje uczenia maszynowego



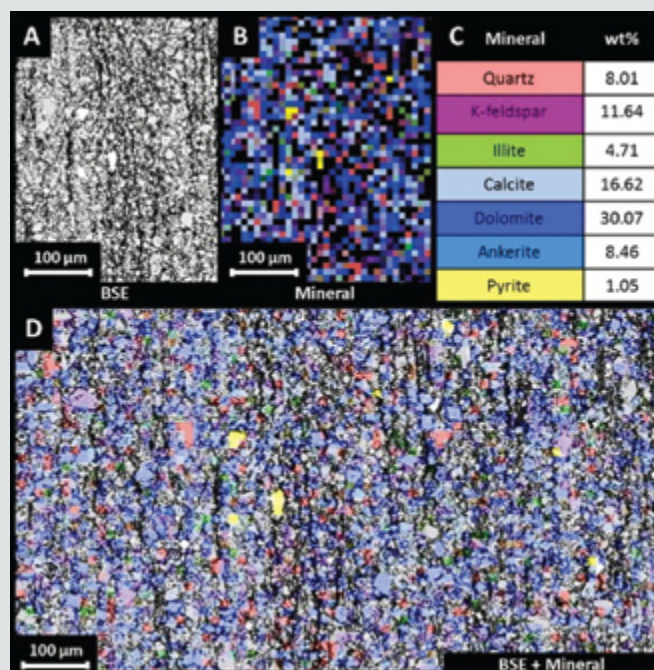
Rys. 2. Obraz elektronów wstecznie rozproszonych (BSE) dla płytki ceramicznej wraz z widmami EDS i pikami promieniowania charakterystycznego w punktach 1 i 2

W tym pierwszym tworzone są zestawy danych uczących, czyli par: wejściowy obiekt uczący – pożądana przez nadzorcę odpowiedź (etykieta). Metoda ta stosowana jest głównie do zadań regresji, klasyfikacji i szacowania prawdopodobieństwa. Uczenie nienadzorowane polega na odkrywaniu w zbiorze danych wzorców bez wcześniej istniejących etykiet i przy minimalnej ingerencji człowieka (w zbiorze treningowym brak tu oczekiwanych odpowiedzi – etykiet). Metodę tę stosuje się głównie do takich zadań, jak klasteryzacja czy redukcja wymiarów. Należy zaznaczyć, że nie istnieje uniwersalny algorytm uczenia maszynowego, który można by zastosować do każdego celu. Metoda ta znajduje również zastosowanie w analizie obrazów, w tym obrazów z elektronowego mikroskopu skaningowego<sup>4, 5, 6</sup>.

W artykule opisano zastosowanie różnych algorytmów uczenia maszynowego w celu analizy obrazów SEM/EDS (skaningowej mikroskopii elektronowej sprzężonej ze spektrometrią rentgenowską z dyspersją energii) materiałów ceramicznych. Opisany problem dotyczył klasyfikacji, czyli przypisania konkretnej fazy chemicznej do każdego piksela na obrazie w celu wyodrębnienia w dalszej kolejności większych obiektów – ziaren. W pierwszym etapie prac skompletowano i uruchomiono środowisko programowania, w skład którego wchodziły pakiety: Anaconda<sup>7</sup>, Numpy<sup>8</sup>, Pandas<sup>9</sup>, Matplotlib<sup>10</sup> i Sklearn<sup>11</sup>. Zestawiono też podstawową bazę danych opartą na własnych wynikach badań. Dokonano wstępnej analizy danych i przygotowania danych do zastosowania w uczeniu maszynowym. Przygotowanie to obejmowało między innymi stworzenie odpowiednich skryptów w języku programowania Python do filtrowania danych i oceny zależności między poszczególnymi zbiorami danych.

## Metodyka badań

Celem badań było wprowadzenie uczenia maszynowego do rozpoznawania faz chemicznych z obrazów mikroskopowych i obrazów składu chemicznego. Baza zawiera dziesiątki tysięcy zdjęć i map rozmieszczenia podstawowych pierwiastków chemicznych. Sam obraz z mikroskopu elektronowego pozwala na rozpoznanie morfologii obiektów (sygnał elektronów wtórnych, SE) lub kontrastu obiektów (obraz elektronów wstecznie rozproszonych, BSE, którego intensywność jest proporcjonalna do średniej liczby atomowej obserwowanego obiektu). Gdy mikroskop dodatkowo jest wyposażony w spektrometr rentgenowski (najczęściej z dyspersją energii, EDS), możliwe



Rys. 3. Przykład automatycznego przypisania pikseli do faz mineralnych o niezbyt wysokiej rozdzielczości (Qemscan, Nanomin, T. Saif et. al. 2017, Applied Energy, v. 202, Multi-scale multi-dimensional microstructure imaging of oil shale pyrolysis using X-ray micro-tomography, automated ultra-high resolution SEM, MAPS Mineralogy and FIB-SEM)

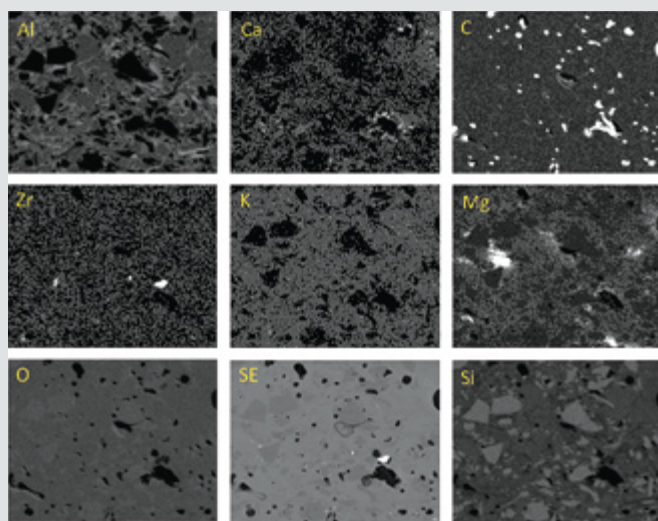
jest uzyskanie widma dla każdego punktu, na którym widoczne są również piki tzw. promieniowania charakterystycznego dla danego pierwiastka (rys. 2). Poprzez analizę intensywności promieniowania charakterystycznego dla wybranych pierwiastków w danym pikselu możliwe jest przypisanie każdego punktu (piksela) obrazu do konkretnej fazy chemicznej. Wyznaczanie granic faz jest czasochłonne, bowiem kadrów mogą być setki, a każdy kadr może mieć kilkanaście obrazów – elektronów wtórnych lub wstecznie rozproszonych oraz kilka/kilkanaście map intensywności promieniowania charakterystycznego. Stosując uczenie maszynowe, wystarczy opisać tylko jeden kadr, by stworzyć model, który pozostałe setki lub tysiące kadrów będzie analizował automatycznie.

Założeniem prac było zwiększenie jakości wyników badań materiałów ceramicznych uzyskiwanych przy wykorzystaniu mikroskopii skaningowej sprzężonej z systemem EDS. Nawet współczesne oprogramowanie do automatycznego rozpoznawania faz, oferowane razem ze sprzętem, daje wyniki nie zawsze zgodne z oczekiwanymi standardami jakościowymi (rys. 3).

Poprawne automatyczne przypisanie każdego piksela i obszaru do odpowiedniej fazy umożliwiła uzyskanie obrazu ziarna w wysokiej rozdzielczości i jest gotowym materiałem do automatycznej analizy wielkości i kształtu ziaren. Analiza taka ma kluczowe znaczenie dla właściwości materiałów, w tym właśnie dla płytek ceramicznych.

## Wyniki badań

W celu stworzenia modelu pozwalającego na poprawne rozpoznawanie faz, przygotowano dane źródłowe uzyskane z obrazowania mikroskopowego polorowanych przekrojów płytek ceramicznych. Na rys. 4 i 5 przedstawiono wyniki analizy danych dla jednego kadru badanego przekroju płytki ceramicznej o szerokości 300 mm. Pod uwagę wzięto mapy intensywności promieniowania SiKa, AlKa, NaKa, ZrLa oraz intensywności obrazu elektronów



Rys. 4. Mapy intensywności promieniowania charakterystycznego AlKa,CaKa, CKa, ZrLa, KKa, MgKa, OKa, SiKa oraz intensywności obrazu elektronów wtórnych (SE)

```
In [7]: df[7::12000]
```

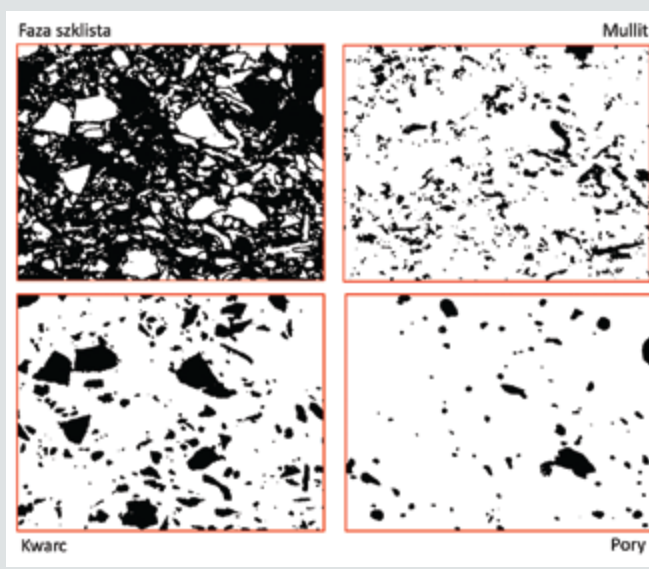
Out[7]:

	SiK	AlK	NaK	ZrL	SE1	Phase
7	0.200000	0.003922	0.003922	0.000000	0.345098	qz
12007	0.129412	0.047059	0.023529	0.003922	0.356863	gl
24007	0.164706	0.015686	0.011765	0.003922	0.352941	qz
36007	0.117647	0.058824	0.027451	0.000000	0.356863	gl
48007	0.117647	0.058824	0.027451	0.000000	0.356863	gl
60007	0.180392	0.003922	0.003922	0.000000	0.349020	qz
72007	0.180392	0.003922	0.003922	0.000000	0.349020	qz
84007	0.180392	0.003922	0.007843	0.000000	0.349020	qz
96007	0.125490	0.047059	0.019608	0.000000	0.356863	gl
108007	0.125490	0.039216	0.015686	0.003922	0.349020	gl
120007	0.117647	0.047059	0.019608	0.000000	0.356863	gl
132007	0.098039	0.086275	0.015686	0.000000	0.356863	mu
144007	0.137255	0.031373	0.011765	0.003922	0.352941	gl
156007	0.141176	0.031373	0.011765	0.003922	0.352941	gl
168007	0.078431	0.035294	0.007843	0.000000	0.345098	gl
180007	0.192157	0.003922	0.003922	0.000000	0.349020	qz
192007	0.149020	0.027451	0.011765	0.003922	0.352941	gl
204007	0.121569	0.043137	0.019608	0.000000	0.356863	gl

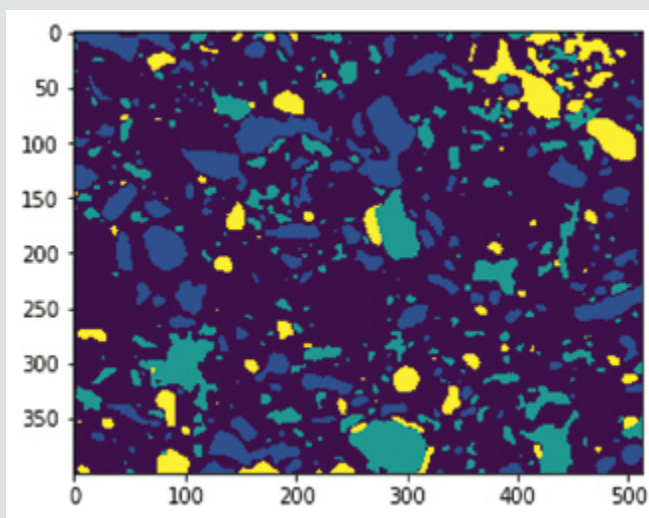
Rys. 6. Fragment danych przygotowanych do maszynowego uczenia klasyfikacji obrazu (qz – kwarc, mu – mullit, gl – faza szklista, po – pory)

wtórnych (SE). Analizę uzyskanych obrazów przeprowadzono przy pomocy oprogramowania ImageJ<sup>12</sup> wraz z własnymi skryptami opracowanymi w języku Jython (implementacji języka Python w Javie). Na podstawie map rozmieszczenia pierwiastków i wzajemnej relacji pierwiastków wydzielono najpierw obszary występowania wyodrębnionych faz w postaci obrazów binarnych, następnie połączono je w jeden obraz, na którym jeden kolor oznacza występowanie jednej fazy. Dla wybranego kadru pozwoliło to na przypisanie do danego piksela rodzaju fazy (w przypadku płytek ceramicznych są to kwarc, faza szklista, mullit, cyrkon i pory).

Uzyskane dane następnie przeprowadzono do postaci bazy Pandas, równocześnie wykonując proces skalowania danych. Na rys. 6 przedstawiono fragment uzyskanej bazy danych; kolejne kolumny dotyczą przeskalowanych intensywności promienio-



Rys. 5. Obrazy występowania głównych faz na przekroju gresowej płytki ceramicznej (stanowią one jednocześnie etykiety dla poszczególnych pikseli zbioru treningowego w uczeniu nadzorowanym)



Rys. 7. Wynik zastosowania modelu do zestawu danych uzyskanych z obrazów map pierwiastków i BSE (kolor żółty – pory, zielony – kwarc, niebieski – mullit, fioletowe tło – szklivo)

wania SiKa, AlKa, NaKa, ZrLa i intensywności obrazu elektronów wtórnych (SE) dla danego piksela. Ostatnia kolumna to Phase, czyli faza chemiczna, która zawiera nazwę kategorii (nie liczby).

Opracowaną bazę danych użyto jako dane do nadzorowanego uczenia maszynowego – klasyfikacji faz. Do przeprowadzenia badań użyto modułu scikit-learn zawierającego podstawowe narzędzia do uczenia maszynowego przeznaczone dla języka Python. Dla obrazu o rozdzielczości 400 x 512 (204 800 pikseli) dokonano w sposób pseudolosowy podziału danych na treningowe (80%) i testowe (20%). Porównano 6 algorytmów klasyfikacji:

- Regresję logistyczną (*Logistic Regression*, LR)
- Liniową analizę dyskryminacyjną (*Linear Discriminant Analysis*, LDA)
- Klasyfikator K-najbliższych sąsiadów (*K Neighbors Classifier*, KNN)
- Drzewo decyzyjne (*Decision Tree Classifier*, CART)
- Klasyfikator naiwny Gaussa (*Gaussian NB*, NB)
- Maszyna wektorów nośnych (SVM)

Wyniki badań wykazały, że w przypadku opracowanych danych z elektronowej mikroskopii skaningowej najlepsze wyniki uzyskano dla algorytmu CART (drzewo decyzyjne), nieco gorsze dla algorytmu K – najbliższych sąsiadów. Jako właściwy wybrano w związku z tym model CART.

Algorytm	Dokładność
LR	0.89492
LDA	0.948737
KNN	0.989972
<b>CART</b>	<b>0.991357</b>
NB	0.943738
SVM	0.941626

Tab. 1. Dokładność klasyfikacji dla zastosowanych algorytmów

```

0.991357421875
[[27278  31  24  104  2]
 [ 133 4221  1  0  0]
 [  39  1 1881  0  0]
 [  18  0  0 7153  0]
 [  0  0  1  0  73]]
precision  recall  f1-score  support
gl         0.99    0.99    0.99    27439
mu         0.99    0.97    0.98    4355
po         0.99    0.98    0.98    1921
qz         0.99    1.00    0.99    7171
zr         0.97    0.99    0.98     74

accuracy
macro avg  0.99    0.99    0.99    40960
weighted avg 0.99    0.99    0.99    40960

```

Tab. 2. Macierz skuteczności zastosowanego algorytmu CART dla klasyfikacji obrazu SEM-EDS płytek ceramicznych (u góry macierz błędów – w pierwszym wierszu szklivo – w pierwszej kolumnie poprawnie i w kolejnych kolumnach błędnie zaklasyfikowane jako szklivo: z mullitu, porów, kwarcu i cyrkonu. Kolejne wiersze dla kolejnych faz). Poniżej precyzja, czułość, wskaźnik f1, liczba pikseli dla poszczególnych faz

Opracowany model osiągnął powyżej 99% skuteczności, gdy zastosowano go do analizy obrazów z innego fragmentu płytki. Na rys. 7 przedstawiono wynik z uwzględnieniem przypisania konkretnego koloru do konkretnej fazy. W porównaniu do analizy z rys. 1 widoczna jest znaczna poprawa jakości uzyskanego obrazu.

## Podsumowanie

W badaniach zastosowano różne algorytmy uczenia maszynowego w zadaniu klasyfikacji obrazu mikroskopowego. Zebrane dane połączone z doświadczeniem operatora najlepiej kwalifikują się do nadzorowanej wersji uczenia maszynowego. Zastosowanie uczenia maszynowego umożliwiło znaczną poprawę jakości analizy obrazu. Z zastosowanych sześciu algorytmów w tym zadaniu najlepiej sprawdził się algorytm drzewa decyzyjnego (CART). Metoda ta jest efektywna dla uzyskania precyzyjnego obrazu wielkości i kształtu ziaren. Z kolei wprowadzenie automatycznego procesu obróbki dużego zbioru danych pozwala na w zasadzie bezobsługową analizę setek lub tysięcy zdjęć i uzyskanie informacji o setkach tysięcy obiektów, takich jak ziarna mineralne, granice faz, pory. Dzięki temu możliwe jest uzyskanie bazy danych dużej liczby takich obiektów, co znacznym stopniem ułatwia analizę wielkości ziaren, cech mikrostrukturalnych i tekstur materiałów. ■

## PRZYPISY

- Y. Liu, T. Zhao, W. Ju, S. Shi, *Materials discovery and design using machine learning*, Journal of Materiomics 3 (3) 2017.
- M. Umehara, H. S. Stein, D. Guevarra, P.F. Newhouse, D.A. Boyd, J.M. Gregoire, *Analyzing machine learning models to accelerate generation of fundamental materials insights*. NPJ Comput. Mater., 5 (1), 2019.
- Y. Liu, T. Zhao, W. Ju, S. Shi, *Materials discovery and design using machine learning*, J. Mater., 3 (3), pp. 159-177, 2017.
- A. Pratap, N. Sardana, *Machine learning-based image processing in materials science and engineering: A review*, Materials Today, InPress, available online 31.01.2022.
- A. Chowdhury, E. Kautz, B. Yener, D. Lewis, *Image driven machine learning methods for microstructure recognition*, Comput. Mater. Sci., 123, 2016.
- E.A. Holm, R. Cohn, N. Gao, A.R. Kitahara, T.P. Matson, B.o. Lei, S.R. Yarasi, *Overview: computer vision and machine learning for microstructural characterization and analysis*, Metall. Mater. Trans. A Phys. Metall. Mater. Sci., 51 (12), 2020.
- Anon, 2020. Anaconda Software Distribution, Anaconda Inc. Available at: <https://docs.anaconda.com/>.
- C.R. Harris, K.J. Millman, S.J. van der Walt, et al, *Array programming with NumPy*, Nature 585, pp. 357-362, 2020.
- W. McKinney, others, *Data structures for statistical computing in python*. In: Proceedings of the 9th Python in Science Conference, p. 51-6, 2010.
- J. D. Hunter, *Matplotlib: A 2D Graphics Environment*, Computing in Science & Engineering, vol. 9, no. 3, pp. 90-95, 2007.
- Pedregosa et al., *Scikit-learn: Machine Learning in Python*, JMLR 12, pp. 2825-2830, 2011.
- J. Schindelin, I. Arganda-Carreras, E. Frise, V. Kaynig, M. Longair, T. Pietzsch, A. Cardona, *Fiji: an open-source platform for biological-image analysis*, Nature Methods, 9 (7), pp. 676-682, 2012.

## Dr Arkadiusz Gasiński

*Instytut Ceramiki i Materiałów Budowlanych*



Zdjęcie: archiwum autora

Absolwent Wydziału Geologii Uniwersytetu Warszawskiego. Lider Obszaru w Grupie Badawczej Ceramiki ICiMB. Specjalizuje się w pracach badawczo-rozwojowych w zakresie właściwości surowców i materiałów ceramicznych i budowlanych. Zainteresowania naukowe obejmują analizę obrazu, dyfrakcję rentgenowską i zastosowanie uczenia maszynowego w praktyce.

[arkadiusz.gasinski@icimb.lukasiewicz.gov.pl](mailto:arkadiusz.gasinski@icimb.lukasiewicz.gov.pl)

## Mgr Paulina Tymowicz-Grzyb

*Instytut Ceramiki i Materiałów Budowlanych*



Zdjęcie: archiwum autora

Absolwentka Wydziału Geologii Uniwersytetu Warszawskiego. Opiekun Pracowni Mikroskopii Skaningowej i Pracowni Szlifierskiej działających przy Grupie Badawczej Ceramika ICiMB. Od kilkunastu lat prowadzi prace badawcze z zakresu inżynierii materiałowej, ceramiki, biomateriałów i biokompozytów, materiałów budowlanych i szkła.

[paulina.tymowicz@icimb.lukasiewicz.gov.pl](mailto:paulina.tymowicz@icimb.lukasiewicz.gov.pl)