

(19)日本国特許庁(JP)

(12)特許公報(B2)

(11)特許番号
特許第7619331号
(P7619331)

(45)発行日 令和7年1月22日(2025.1.22)

(24)登録日 令和7年1月14日(2025.1.14)

(51)国際特許分類 F I
G 0 1 N 33/204 (2019.01) G 0 1 N 33/204
G 0 2 B 21/00 (2006.01) G 0 2 B 21/00

請求項の数 9 (全15頁)

(21)出願番号	特願2022-93983(P2022-93983)	(73)特許権者	000001258 J F E スチール株式会社 東京都千代田区内幸町二丁目 2 番 3 号
(22)出願日	令和4年6月9日(2022.6.9)	(74)代理人	100147485 弁理士 杉村 憲司
(65)公開番号	特開2023-180580(P2023-180580 A)	(74)代理人	230118913 弁護士 杉村 光嗣
(43)公開日	令和5年12月21日(2023.12.21)	(74)代理人	100165696 弁理士 川原 敬祐
審査請求日	令和6年1月26日(2024.1.26)	(74)代理人	100180655 弁理士 鈴木 俊樹
		(72)発明者	山田 泰徳 東京都千代田区内幸町二丁目 2 番 3 号 J F E スチール株式会社内
		(72)発明者	山下 孝子

最終頁に続く

(54)【発明の名称】 材料組織の相の抽出方法、材料組織の相の抽出装置及び顕微鏡装置

(57)【特許請求の範囲】

【請求項 1】

材料組織からマッピング情報を取得する第 1 入力工程と、
前記材料組織の相の情報を取得する第 2 入力工程と、
前記マッピング情報及び前記相の情報に基づく評価関数を定義する評価関数定義工程と、
前記評価関数に基づいて前記材料組織の相を抽出する相抽出工程と、
を備え、

前記評価関数が、前記マッピング情報の統計的な分布に基づいて前記材料組織の相を分離する項とノイズを抑制し界面を平滑化する項とを含む、材料組織の相の抽出方法。

【請求項 2】

前記マッピング情報が、前記材料組織の成分分布と相関のある分布情報である、請求項 1 に記載の材料組織の相の抽出方法。

【請求項 3】

前記分布情報が、成分の濃度分布である、請求項 2 に記載の材料組織の相の抽出方法。

【請求項 4】

前記材料組織の相の情報が、熱力学計算、数値解析又は分析装置で得られる情報である、請求項 1 に記載の材料組織の相の抽出方法。

【請求項 5】

前記材料組織の相の情報が、分率又は成分濃度である、請求項 4 に記載の材料組織の相の抽出方法。

【請求項 6】

前記材料組織の相を分離する項が事後確率の対数である、請求項 1 に記載の材料組織の相の抽出方法。

【請求項 7】

材料組織からマッピング情報を取得し、前記材料組織の相の情報を取得する入力部と、前記マッピング情報及び前記相の情報に基づく評価関数を定義する評価関数定義部と、前記評価関数に基づいて前記材料組織の相を抽出する相抽出部と、
を備え、

前記評価関数が、前記マッピング情報の統計的な分布に基づいて前記材料組織の相を分離する項とノイズを抑制し界面を平滑化する項とを含む、材料組織の相の抽出装置。

10

【請求項 8】

請求項 7 に記載の材料組織の相の抽出装置によって取得される前記マッピング情報を得る、顕微鏡装置。

【請求項 9】

前記材料組織の元素分析を行う、請求項 8 に記載の顕微鏡装置。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本開示は材料組織の相の抽出方法、材料組織の相の抽出装置及び顕微鏡装置に関する。

【背景技術】

20

【0002】

材料において、内部組織の構造はその特性に大きな影響を与える。例えば、鉄鋼材料の Transformation Induced Plasticity (TRIP) 鋼はマルテンサイト又はベイナイトと残留オーステナイト(残留) からなる複合組織を有し、残留 の加工誘起マルテンサイト変態によって優れた強度と延性のバランスを示す。延性は残留 の分率に強く依存することが知られており、焼戻し過程におけるオーステナイトの分布及び形態が残留 の形成に寄与することが指摘されている。材料の特性を理解する上で、材料組織の相の分率、分布及び形態を高精度に分析することが極めて重要となる。

【0003】

近年の種々の画像解析技術及び機械学習の発展によって、金属材料の組織画像、金属材料成分の濃度分布などのマッピング情報から自動又は半自動的に材料組織の相をクラスタリング・抽出する手法が開示されている。例えば、パーセプトロン、ディープラーニング、ランダムフォレスト、サポートベクターマシンを用いた材料組織の相の抽出方法がある。これらの手法を活用することにより、従来は熟練の技術者によって時間をかけて行われていた材料組織の相の抽出が、省力かつ高速で処理できるようになりつつある。

30

【0004】

一方で、金属材料中の組織の形成過程を精度良くシミュレーションする手法として、熱力学と自由エネルギーの変分原理に基づいた Phase Field (PF) 法がある。PF 法では、自由エネルギーを適切に選択することで様々な組織の形成過程をシミュレーション可能となる。また、PF 法は、ノイズに頑健なセグメンテーション手法の一つである Mumford - Shah segmentation モデル(非特許文献 1) と類似した数学的な構造を有しており、材料組織の相の抽出への応用が可能と考えられる。

40

【先行技術文献】

【非特許文献】

【0005】

【文献】J. Lie et al., "A binary level set model and some applications to Mumford - Shah image segmentation" IEEE Transactions on Image Processing 15 (2006), p. 1171 - 1181

【発明の概要】

50

【発明が解決しようとする課題】**【0006】**

しかしながら、材料組織の教師画像に基づき作成された機械学習モデルは、高い精度で材料組織の相を抽出できるが、教師画像と測定条件の異なる画像に対しては適切な材料組織の相の抽出を行えない場合が多い。これは教師画像で示された材料組織の相と測定条件の異なる材料組織の相を異なる相と識別するためである。熟練の技術者であれば、このような測定条件の変化に対しても材料組織の相を識別し、抽出を行うことができる。これは熟練の技術者が分析装置及び材料に関する知識、他の分析装置で得られた材料組織の画像などに基づき総合的に材料組織の相を識別するためである。このような多角的な情報に基づき、材料組織の相を識別し、抽出できれば、コンピュータによる材料組織の相の抽出精度が向上すると考えられる。

10

【0007】

かかる事情に鑑みてなされた本開示の目的は、ノイズへの頑健性を有しかつ相の事前情報を考慮した材料組織の相の抽出方法、材料組織の相の抽出装置及び顕微鏡装置を提供することにある。

【課題を解決するための手段】**【0008】**

本開示者らは、上記課題を解決する方途について鋭意検討した。その結果、本開示者らは、材料組織の相に関し、熱力学計算又は数値解析により算出した相の分率、相に含まれる成分の濃度、例えばXRD (X-ray Diffraction)、EPMA (Electron Probe Micro Analyzer) などの分析装置で測定又は解析して得られた情報を事前情報として用いることによって、材料組織の相を高精度に抽出できることを見出した。

20

【0009】

より具体的に述べると、本開示の一実施形態に係る材料組織の相の抽出方法は、材料組織からマッピング情報を取得する第1入力工程と、前記材料組織の相の情報を取得する第2入力工程と、前記マッピング情報及び前記相の情報に基づく評価関数を定義する評価関数定義工程と、前記評価関数に基づいて前記材料組織の相を抽出する相抽出工程と、を備える。

30

【0010】

本開示の一実施形態に係る材料組織の相の抽出装置は、材料組織からマッピング情報を取得し、前記材料組織の相の情報を取得する入力部と、前記マッピング情報及び前記相の情報に基づく評価関数を定義する評価関数定義部と、前記評価関数に基づいて前記材料組織の相を抽出する相抽出部と、を備える。

【0011】

本開示の一実施形態に係る顕微鏡装置は、上記の材料組織の相の抽出装置によって取得される前記マッピング情報を得る。

【発明の効果】

40

【0012】

本開示によれば、ノイズへの頑健性を有しかつ相の事前情報を考慮した材料組織の相の抽出方法、材料組織の相の抽出装置及び顕微鏡装置を提供することができる。

【図面の簡単な説明】**【0013】**

【図1】図1は、本開示の一実施形態に係る材料組織の相の抽出方法の処理を例示するフローチャートである。

【図2A】図2Aは、図1の材料組織の相の抽出方法の一部工程の詳細な計算手順を示すフローチャートである。

【図2B】図2Bは、図1の材料組織の相の抽出方法の一部工程の詳細な計算手順を示す

50

フローチャートである。

【図3】図3は、本開示の一実施例と他の方法による材料組織の相の抽出結果を比較した図である。

【図4】図4は、本開示の一実施例と他の方法による材料組織の相の抽出結果を比較した図である。

【図5】図5は、本開示の一実施形態に係る材料組織の相の抽出装置を備える材料組織の相の抽出システムの構成例を示す模式図である。

【発明を実施するための形態】

【0014】

以下、図面を参照して本開示の実施形態に係る材料組織の相の抽出方法、材料組織の相の抽出装置及び顕微鏡装置が説明される。以下に説明する実施形態は、本開示の例示的な実施形態であって、本開示の内容を限定するものでない。

【0015】

[材料組織の相の抽出方法]

図1は、本実施形態に係る材料組織の相の抽出方法を示すフローチャートである。材料組織の相の抽出方法は、材料組織からマッピング情報を取得する工程（第1入力工程、ステップS1）と、材料組織の相の情報を取得する工程（第2入力工程、ステップS2）と、マッピング情報及び相の情報に基づく評価関数を定義する工程（評価関数定義工程、ステップS3）と、評価関数に基づいて材料組織の相を抽出する工程（相抽出工程、ステップS5）を含む。ここで、本実施形態のように、予備計算によって初期条件を決定する工程（初期条件決定工程、ステップS4）が相を抽出する工程の前に挿入されてよい。また、本実施形態のように、抽出した相の情報を出力する工程（出力工程、ステップS6）が含まれてよい。

【0016】

また、図2A及び図2Bは、初期条件決定工程及び相抽出工程の詳細な計算手順を示すフローチャートである。以下に、各工程を説明し、図2A及び図2Bについては初期条件決定工程及び相抽出工程の説明において参照する。

【0017】

（材料組織からマッピング情報を取得する工程）

マッピング情報は、材料組織の成分分布と相関のある分布情報である。分布情報は、例えば成分の濃度分布であってよい。マッピング情報 $X^{o,b} = (X_{1}^{o,b}, \dots, X_{N}^{o,b})$ は、1つ以上であるN個の測定点から構成される。また、ある測定点nにおける測定値 $X_n^{o,b} = (X_{n,1}^{o,b}, \dots, X_{n,M}^{o,b})$ は、1以上M成分のベクトルによって構成される。以下において、測定点を示すパラメータのnは1からNまでの値をとり得る。また、同様に1以上であるKを用いて、相を示すパラメータのkは1からKまでの値を取り得るとする。例えば \sum_k はパラメータのkを1からKまで変化させた場合の和を意味する。

【0018】

マッピング情報 $X^{o,b}$ は、EPMA、SEM (Scanning Electron Microscope) など様々な分析装置で測定又は解析して得られた組織に含まれる成分の濃度分布などの物理情報、組織画像などである。また、マッピング情報 $X^{o,b}$ は、物理情報、組織画像などを、さらに機械学習又は数値解析によって加工した情報であってよい。

【0019】

（材料組織の相の情報を取得する工程）

材料組織の相の情報は、熱力学計算、数値解析又は分析装置で得られる情報である。材料組織の相の情報は、具体例として、分率又は成分濃度であってよい。材料組織の相の情報は、任意の個数 N_A 個の相の平均情報 $A^{o,b} = (A_1^{o,b}, \dots, A_{N_A}^{o,b})$ であり得る。また、材料組織の相の情報は、熱力学データベース、数値解析又はXRD若しくは中性子回折などの実験から予測した、以下の式(1)で表される物理情報 X^{ref} の確率密度関数であり得る。

10

20

30

40

50

【 0 0 2 0 】

【数 1】

$$p[X^{\text{ref}}|\theta^{\text{ref}}] \quad \dots \text{式 (1)}$$

【 0 0 2 1 】

ここで、式 (1) のパラメータ θ^{ref} の構成は確率密度関数の種類によって決まる。相の平均情報 A^{ob} 又は確率密度関数のパラメータ θ^{ref} で表される相の情報は、マッピング情報 X^{ob} と相関関係を有する物理量である。相の情報は、例えば XRD で測定又は解析して得られた材料組織の相の分率、EPMA、SEM-EDS での測定又は解析で得られた相に含まれる成分の濃度、熱力学データベースを用いた熱力学計算、数値解析で算出した相の分率、相に含まれる成分の濃度など、相に関する物理量を用いることが好ましい。

10

【 0 0 2 2 】

本開示の方法は、適切な材料組織の相の情報を、材料組織から取得したマッピング情報 X^{ob} に統合することでより精度の高い材料組織の相の抽出が可能となる。

【 0 0 2 3 】

(評価関数を定義する工程)

評価関数 F は、マッピング情報 X^{ob} の統計的な分布に基づいて材料組織の相を分離する項 L とノイズを抑制し界面を平滑化する項 F_{int} の 2 つの項を含み、以下の式 (2) で表される。

20

【 0 0 2 4 】

【数 2】

$$F = -L + F_{\text{int}} \quad \dots \text{式 (2)}$$

【 0 0 2 5 】

材料組織の相を分離する項 L は、対数尤度、事後確率の対数、相互情報量、カルバック・ライブラー情報量などを用いて与えることができるが、事後確率の対数を用いることが好ましい。以下に、材料組織の相を分離する項 L が事後確率の対数である場合を例に説明する。

30

【 0 0 2 6 】

マッピング情報 X^{ob} は測定誤差及びノイズを含むと考えられ、実際には観測できない真の分布が $X^* = (X_1^*, \dots, X_N^*)$ で表される。

【 0 0 2 7 】

ここで、 X_n^* は、測定点 n における真の値を表す。また、真の分布 X^* は確率密度関数 $p[X^* | \theta^*]$ によって与えられる。ここで、組織中に K 種類の相があると仮定したとき、 $\theta^* = (\theta_1^*, \dots, \theta_K^*)$ は真の確率密度関数のパラメータの集合であり、確率密度関数のパラメータで表される相 k の相の情報が θ_k^* で表される。また、測定点 n に k 相が存在する確率を $h_{n,k}$ とすると、その集合は $H = (h_{n,1}, \dots, h_{n,K})$ で表される。

40

【 0 0 2 8 】

ここで、真の分布 X^* となる確率密度関数は、相の存在確率 $h_{n,k}$ と各相の確率密度関数 $p[X_n^* | \theta_k^*]$ の積の和で表され、以下の式 (3) で近似的に与えられる。

【 0 0 2 9 】

【数 3】

$$p[X^* | \theta^*, H] = \prod_n (\sum_k h_{n,k} p[X_n^* | \theta_k^*]) \quad \dots \text{式 (3)}$$

【 0 0 3 0 】

実際に測定されるマッピング情報 X^{ob} は、真の分布 X^* に対して誤差及びノイズを含む

50

。そのため、実際に測定されるマッピング情報 X^{ob} が測定される確率は、以下の式 (4) で記述される。

【0031】

【数4】

$$p[X^{ob}|\theta^{noise}, \theta^*, H] = \int dX^* p[X^{ob}|X^*, \theta^{noise}] p[X^*|\theta^*, H] \quad \dots \text{式 (4)}$$

【0032】

ここで、 θ^{noise} は実際に測定されるマッピング情報 X^{ob} と真の分布 X^* の誤差を示す確率密度関数のパラメータであり、測定装置の精度と確度に依存する。

10

【0033】

ベイズの定理によって、パラメータ θ^{noise} 、 θ^* 、 H の事後確率は、以下の式 (5) で近似的に表される。

【0034】

【数5】

$$p[\theta^{noise}, \theta^*, H|X^{ob}] \propto p[X^{ob}|\theta^{noise}, \theta^*, H] p[\theta^{noise}] p[\theta^*] p[H] \quad \dots \text{式 (5)}$$

【0035】

ここで、パラメータ θ^{noise} 、 θ^* 及び H の事前確率である $p[\theta^{noise}]$ 、 $p[\theta^*]$ 及び $p[H]$ は、それぞれ、測定誤差の特徴及び真の分布 X^* の確率密度関数の形状、相の分布を記述する。式 (5) の対数を取ることで、相を分離する項 L は以下の式 (6) で容易に定められる。

20

【0036】

【数6】

$$L[\theta^{noise}, \theta^*, H|X^{ob}] = \ln[p[X^{ob}|\theta^{noise}, \theta^*, H]] + \ln[p[\theta^{noise}]] + \ln[p[\theta^*]] + \ln[p[H]] \quad \dots \text{式 (6)}$$

30

【0037】

次に、ノイズを抑制し界面を平滑化する項 F_{int} が説明される。これは PF 法における界面エネルギー項に対応する。PF 法における界面エネルギー項の定義は $double\ well\ potential$ 又は $double\ obstacle\ potential$ を用いたモデルが存在するが、ここでは Steinbach の Multi-Phase Field (MPF) 法を例に説明する。Steinbach の MPF 法において項 F_{int} は、以下の式 (7) で定義される。

【0038】

【数7】

$$F_{int}[\Phi] = \sum_n \sum_k \sum_{k'} \frac{4\sigma}{\eta} \left(\phi_{n,k} \phi_{n,k'} - \frac{\eta^2}{\pi^2} \nabla \phi_{n,k} \cdot \nabla \phi_{n,k'} \right) \quad \dots \text{式 (7)}$$

40

カッコ内の第一項は $multi\ obstacle\ potential$ であり相を分ける働きをし、第二項は勾配エネルギー項であり秩序変数 $\phi_{n,k}$ の勾配を小さくする働きをする。このとき、 η は界面幅であり、 σ は単位面積当たりの界面エネルギーとなる。本開示の方法においては、 η と σ は界面の平滑さの程度を決めるためのパラメータとなる。測定点 n 上の k 相の確率密度関数が以下の式 (8) を満たす場合に、測定点 n が k 相であると正しく推定されるようにパラメータが設定されればよい。これにより、評価関数が導出される。

50

【 0 0 3 9 】

【数 8】

$$p[X_n^*|\theta_k^*] \gg p[X_n^*|\theta_{k'}^*](k' \neq k) \quad \dots \text{式 (8)}$$

【 0 0 4 0 】

次に、本開示の特徴の1つである、材料組織の相の情報を評価関数の中に導入する方法が説明される。具体的には、式(6)の右辺の第3項と第4項の事前確率に対して、種々の熱力学計算、数値解析、分析装置で得た相の情報(物理量)である確率密度関数のパラメータ k^{ref} 、若しくは、相の平均情報 A^{ob} を取り込むことにより、材料組織の相の情報

10

【 0 0 4 1 】

熱力学計算、数値解析又は分析装置を用いた分析によって確率密度関数 $p[X_n^{ref} | k^{ref}]$ が推測可能である。ここで、確率密度関数のパラメータ k^{ref} と真のパラメータ k^* の誤差及び分散を推定することが可能であり、 $p[]$ は以下の式(9)で定義できる。

【 0 0 4 2 】

【数 9】

$$p[\theta^*] = p[\theta^*|\theta^{ref}, \Sigma_\theta^{ref}] \quad \dots \text{式 (9)}$$

20

【 0 0 4 3 】

k^{ref} は k^{ref} と k^* の間の誤差及び k^{ref} の予測モデルの精度によって定まる。 k^{ref} の導出方法の一例として、熱力学データベースの活用が挙げられる。熱力学データベースは、温度又は組成が与えられたときの自由エネルギー又は活量などのデータを蓄積したデータベースである。仮に対象の系が熱平衡状態近傍にある場合、統計熱力学に従い状態 X^* の出現確率 $p[X^*]$ は測定領域の体積 v における自由エネルギー $f[X^*]$ を用いて、以下の式(10)で表される。

【 0 0 4 4 】

【数 10】

$$p[X^*|\theta^*] \propto \exp[-f[X^*]/k_B T] \quad \dots \text{式 (10)}$$

30

【 0 0 4 5 】

ここで、 k_B はボルツマン係数である。 T は組織形成時の温度である。自由エネルギー f に対し二次の近似を適用した場合、 $p[X^* | \theta^*]$ は X^* の平衡状態を期待値として、以下の式(11)を分散共分散行列とするガウス分布となる。

【 0 0 4 6 】

【数 11】

$$2k_B T [\partial^2 f / \partial X^t \partial X]^{-1} \quad \dots \text{式 (11)}$$

40

【 0 0 4 7 】

この場合において、系の非平衡性又は熱力学データベースの精度に基づいて k^{ref} を定めることができる。より強い非平衡性を持つ場合に、Scheilモデル、反応拡散系の数値解析又はPhase Field法などを用いて、真の分布 X^* の確率密度を予測することが可能である。

【 0 0 4 8 】

一方で、材料組織の相の平均情報 A^{ob} が既知の場合、式(6)の $p[H]$ によって平

50

均情報 A^{ob} の影響を取り込むことができる。ここで、適切な関数 $A_k^{ref}[X^{ob}, H]$ によって k 相の平均情報 A^{ob} を X^{ob} と H から推測することができる。このときの各相に
関数 A_k^{pre} を定義することで、平均情報 A^{pre} は、以下の式 (12) と予測される。

【0049】

【数12】

$$A^{pre}[X^{ob}, H] = \frac{1}{N} \sum_n h_{n,k} A_k^{pre}[X_n^{ob}] \quad \dots \text{式 (12)}$$

【0050】

したがって、 $A_k^{pre}[X^{ob}, H]$ の予測精度と測定誤差のパラメータ A^{pre} を用いて $p[H]$ を以下の式 (13) で表すことができる。

【0051】

【数13】

$$p[H] = p[A^{ref}[X^{ob}, H] | A^{ob}, \Sigma_A^{pre}] \quad \dots \text{式 (13)}$$

【0052】

これに $p[\theta^*]$ 及び $p[H]$ の定義によって、真の分布 X^* の確率密度、相の平均情報などの事前知識を考慮した関数 L を導出し、評価関数 F が定義できる。

【0053】

(予備計算によって初期条件を決定する工程)

効率性の観点から、予備計算として、パラメータ θ^{noise} 及び θ^* の初期値の計算が行われてよい。ここで、取得可能な初期値があれば、初期値が取得されてよい (図2AのステップS11)。予備計算では、パラメータ H の空間分布は考慮せず、相の割合 $\phi = (\phi_1, \dots, \phi_k)$ を用いて $h_{n,k} = \phi_k$ とする。予備計算では、上記の評価関数 F に基づいて、本工程での評価関数 F' が決定される (図2AのステップS12)。例えば評価関数 F' は、式 (2) の第一項を用いて θ^{noise} 、 θ^* 及び ϕ の関数として以下の式 (14) で決定される。

【0054】

【数14】

$$F' = -L[\theta^{noise}, \theta^*, \phi] \quad \dots \text{式 (14)}$$

【0055】

評価関数 F' を拘束条件として ϕ_k ($k=1$) の下で最小化することによって θ^{noise} 、 θ^* 及び ϕ が決定される (図2AのステップS13)。最小化の計算手法は、例えばニュートン法、共役勾配法などが適宜選択され得る。そして、評価関数 F' の値が収束したと判定される場合に初期値が決定される (図2AのステップS14)。ただし、最小値である必要はなく、準最適解であってもかまわない。

【0056】

(材料組織の相を抽出する工程)

次に、本計算として、組織の空間分布を考慮した計算が行われる。本計算では、0 から 1 まで連続的に変化する内挿関数 $q[\phi_{n,k}]$ を用いて、 $h_{n,k}$ を以下の式 (15) とする。

【0057】

【数15】

$$h_{n,k} = q[\phi_{n,k}] / \sum_k q[\phi_{n,k}] \quad \dots \text{式 (15)}$$

10

20

30

40

50

【 0 0 5 8 】

秩序変数 $\phi = (\phi_{n,1}, \dots, \phi_{n,k}, \dots, \phi_{n,K})$ 、 $\phi_{n,k} = (\phi_{n,k,1}, \dots, \phi_{n,k,k}, \dots, \phi_{n,k,K})$ は、相の種類を抽出するためのパラメータであり、 $\sum_k \phi_{n,k} = 1$ を満たす。また、 $\phi_{n,k}$ は以下の式 (16) を満たす。

【 0 0 5 9 】

【数 1 6】

$$\phi_{n,k} \approx 1, \phi_{n,k'} \approx 0 (k' \neq k) \quad \dots \text{式 (16)}$$

【 0 0 6 0 】

秩序変数 ϕ の初期値は、予備計算で導出された θ^{noise} 、 θ^* 及び ϕ によって、以下の式 (17) で定義すると効率的である (図 2 B のステップ S 2 1)。また、本工程における評価関数 F は秩序変数 ϕ の関数として、以下の式 (18) で決定される (図 2 B のステップ S 2 2)。

【 0 0 6 1 】

【数 1 7】

$$\phi_{n,k} \leftarrow \frac{\pi_k p[X_n^{\text{ob}} | \theta_k^*, \theta^{\text{ob}}]}{\sum_k \pi_k p[X_n^{\text{ob}} | \theta_k^*, \theta^{\text{ob}}]} \quad \dots \text{式 (17)}$$

$$F = -L[\theta^{\text{noise}}, \theta^*, \phi] + F_{\text{int}}[\phi] \quad \dots \text{式 (18)}$$

【 0 0 6 2 】

ここで、 $\sum_k \phi_{n,k} = 1$ の拘束条件を与えるためラグランジアン L_g が、以下の式 (19) のように定義される。

【 0 0 6 3 】

【数 1 8】

$$L_g = -L[\theta^{\text{noise}}, \theta^*, \phi] + F_{\text{int}}[\phi] - \sum_n \lambda_n (\sum_k \phi_{n,k} - 1) \quad \dots \text{式 (19)}$$

【 0 0 6 4 】

以下の式 (20) の条件を満たす解を数値解析することで、拘束条件下の評価関数 F の最小値が求まる (図 2 B のステップ S 2 3)。評価関数 F の値が収束したと判定される場合に秩序変数 ϕ が決定される (図 2 B のステップ S 2 4)。ただし、最小値である必要はなく、準最適解であってもかまわない。

【 0 0 6 5 】

【数 1 9】

$$\frac{\partial L_g}{\partial \theta^{\text{noise}}} = 0, \frac{\partial L_g}{\partial \theta^*} = 0, \frac{\partial L_g}{\partial \phi_{n,k}} = 0, \frac{\partial L_g}{\partial \lambda_{n,k}} = 0 \quad \dots \text{式 (20)}$$

【 0 0 6 6 】

最終的に得られた各座標の秩序変数より最大の秩序変数を抽出することで、以下の式 (21) によって、測定点 n における相の種類 k_n を推定することができる (図 2 B のステップ S 2 5)。ここで、 arg max は秩序変数 $\phi_{n,k}$ を最大にする k を出力する関数を意味する。

【 0 0 6 7 】

【数 2 0】

10

20

30

40

50

$$k_n = \operatorname{argmax}_{1 \leq k \leq K} \{\phi_{n,k}\} \quad \dots \text{式 (21)}$$

【0068】

(抽出した相の情報を出力する工程)

推定された測定点 n における相の種類 k_n の情報はユーザが確認可能なように出力される。抽出した相の情報は、各種ディスプレイなどの表示装置に表示されてよい。

【0069】

[材料組織の相の抽出装置]

図5は、本開示の一実施形態に係る材料組織の相の抽出装置10を備える材料組織の相の抽出システム1(以下、単に「抽出システム1」と称することがある)の構成例を示す模式図である。上記の材料組織の相の抽出方法は、材料組織の相の抽出装置10(以下、単に「抽出装置10」と称することがある)によって実行される。

【0070】

抽出システム1は、抽出装置10と、顕微鏡装置30と、を備える。抽出装置10は、入力部11と、出力部12と、演算部13と、を備える。演算部13は、評価関数定義部14と、初期条件決定部15と、相抽出部16と、を備える。

【0071】

(顕微鏡装置)

顕微鏡装置30は、抽出装置10によって取得されるマッピング情報を得る。マッピング情報は、上記の通り、材料組織に含まれる成分の濃度分布などの物理情報、組織画像などである。顕微鏡装置30は、例えばEPMA又はSEMなどであるが、マッピング情報を測定又は解析する装置であれば、これらに限定されない。顕微鏡装置30は、例えばX線などを用いて材料組織の元素分析を行う装置であってよい。

【0072】

(入力部)

入力部11は、抽出装置10の入力インターフェースであって、第1入力工程及び第2入力工程を実行する。つまり、入力部11は、材料組織からマッピング情報を取得し、材料組織の相の情報を取得する。

【0073】

(出力部)

出力部12は、抽出装置10の出力インターフェースであって、出力工程を実行する。つまり、出力部12は、演算部13によって抽出された相の情報を、例えば各種ディスプレイなどの表示装置に表示させる。

【0074】

(演算部)

演算部13は、材料組織の相を抽出するための演算を行う。また、演算部13は、抽出装置10の全体を制御する制御部としての機能を備えてよい。演算部13は、1つ以上のプロセッサであってよい。プロセッサは、例えば汎用のプロセッサ又は特定の処理に特化した専用プロセッサであるが、これらに限られず任意のプロセッサとすることができる。

【0075】

上記のように、本実施形態において、演算部13は、評価関数定義部14と、初期条件決定部15と、相抽出部16と、を備える。評価関数定義部14、初期条件決定部15及び相抽出部16の機能はソフトウェアによって実現されてよい。例えば演算部13がアクセス可能な記憶装置に、1つ以上のプログラムが記憶されていてよい。記憶装置に記憶されたプログラムは、プロセッサである演算部13によって読み込まれると、演算部13を評価関数定義部14、初期条件決定部15及び相抽出部16として機能させてよい。

【0076】

(評価関数定義部)

10

20

30

40

50

評価関数定義部 14 は、評価関数定義工程を実行する。つまり、評価関数定義部 14 は、マッピング情報及び相の情報に基づく評価関数を定義する。

【0077】

(初期条件決定部)

初期条件決定部 15 は、初期条件決定工程を実行する。つまり、初期条件決定部 15 は、相抽出工程の前に、予備計算によって初期条件を決定する。

【0078】

(相抽出部)

相抽出部 16 は、相抽出工程を実行する。つまり、相抽出部 16 は、評価関数に基づいて材料組織の相を抽出する。

【0079】

ここで、抽出装置 10 は、特定の装置に限定されないが、一例としてコンピュータで実現され得る。コンピュータは、例えば市販されている汎用的なものを使用できる。コンピュータは、例えばメモリ及びハードディスクドライブなどの記憶装置、CPU及び入出力装置を備える。演算部 13 はCPUで実現されてよい。演算部 13 によって読み込まれるプログラムは記憶装置に記憶されていてよい。また、入力部 11 及び出力部 12 は入出力装置で実現されてよい。

【0080】

[実施例]

本実施例では、混合ガウスモデルにより確率密度関数 $p[X^{ob} | noise, *, H]$ を定め、ガウス分布により確率密度関数 $p[noise]$ 、 $p[*]$ 、 $p[H]$ を決定した。パラメータ $noise = (noise_1, noise_2, \dots)$ 及び $* = (*_1, *_2, \dots)$ は平均値と分散の組み合わせによって与えられた。

【0081】

(実施例 1)

実施例 1 において、熱力学データベースで得られた計算結果に基づく平均情報を用いて、マッピング情報から材料組織の相を抽出するための計算が実行された。 - の二相域における鋼中の炭素濃度のマッピング情報(図 3 の (a - 0)) が用いられた。パラメータ * を推定するため式 (10) を使用し、自由エネルギー関数は二次の近似を使用した。推定されるパラメータ * と熱力学データより計算したパラメータ p^{re} はガウス分布に従うものとした。

【0082】

図 3 の (a - 0) は基準となる元素マップであり、基準となる元素マップに、(a - 1) としてノイズ、(a - 2) としてキズ、(a - 3) として数値シフトを加えたデータ(加工データ) が用意された。本開示の方法が測定条件の変化に対して頑健であることを示すため、ランダムフォレストとの比較計算を行った。ランダムフォレストは加工データでなく、無加工の実績データを用いて学習を行った。(c - 0) から (c - 3) はランダムフォレストの結果であり、ノイズ、傷、数値のシフトの影響を強く受けていることが分かる。これに対して (b - 0) から (b - 3) の実施例 1 の結果は、どの条件においてもおよそ等しい結果が得られた。つまり、実施例 1 では、ノイズ及び測定条件の変化に対して頑健な組織抽出が行えることが示された。これは、本開示の方法においてパラメータ $noise$ 及び F_{int} が導入された効果と考えられる。ここで、図 3 の (b - 0) から (b - 3) 及び (c - 0) から (c - 3) において、白色がオーステナイト相を示し、黒色がフェライト相を示す。

【0083】

(実施例 2)

実施例 2 では、FE-EPMA(電界放出型電子線マイクロアナライザ)で得た C 濃度のマッピング情報を XRD 測定で得た組織の平均情報を組み合わせて、材料組織の相の抽出計算が実行された。図 4 の (a) はハイテン鋼板中の炭素元素の分布を示す。図 4 の (b - 1) は比較例であって、平均情報を得ることなく、 $p[noise]$ 、 $p[*]$ 及

10

20

30

40

50

び p [] のそれぞれを固定値として計算した場合の計算結果である。黒く塗られた領域は C が濃化している領域であり残留 相に相当すると考えられる。しかしながら、 XRD で測定された残留 量が 6.03% であるのに対し、図 4 の (b - 1) で検出された C 濃化領域の分率は 25.4% 程度であった。つまり、 C 濃化領域 (残留 量) に関する情報に大きな差が生じており、情報の一貫性がない。

【 0 0 8 4 】

そこで、上記の実施形態の材料組織の相の抽出方法の通りに、 XRD で測定された残留 量 6.03% と残留 中の C 濃度 $0.63 \text{ wt } \%$ が事前情報として取得された。上記の式 (1 2) において $A_k^{pre} [X_n^{ob}] = 1$ と置くことで、 XRD により測定された残留 量の情報が与えられ、 r^{ref} に XRD で測定された残留 中の平均濃度の情報が加えられた。図 4 の (b - 2) は XRD の事前情報を用いて組織抽出を行った結果を示す。図 4 の (b - 2) においても、黒色が C 濃化領域 (残留 相に相当) を示す。図 4 の (b - 2) において抽出された C 濃化領域の割合は 6.1% であり、 XRD で測定された残留 量とほぼ一致しており、残留 量の分布を予測する目的において適切な相の抽出が行われている。

10

【 0 0 8 5 】

以上のように、本実施形態に係る材料組織の相の抽出方法、材料組織の相の抽出装置及び顕微鏡装置は、材料組織から取得したマッピング情報と材料組織の相の事前情報を統合することによって、マッピング情報と材料組織の相の情報とに一貫性があり、ノイズへの頑健性を有する。

20

【 0 0 8 6 】

本開示の実施形態について、諸図面及び実施例に基づき説明してきたが、当業者であれば本開示に基づき種々の変形又は修正を行うことが容易であることに注意されたい。従って、これらの変形又は修正は本開示の範囲に含まれることに留意されたい。例えば、各構成部又は各工程などに含まれる機能などは論理的に矛盾しないように再配置可能であり、複数の構成部又は工程などを 1 つに組み合わせたり、或いは分割したりすることが可能である。本開示に係る実施形態は装置が備えるプロセッサにより実行されるプログラムを記録した記憶媒体としても実現し得るものである。本開示の範囲にはこれらも包含されるものと理解されたい。

【 符号の説明 】

30

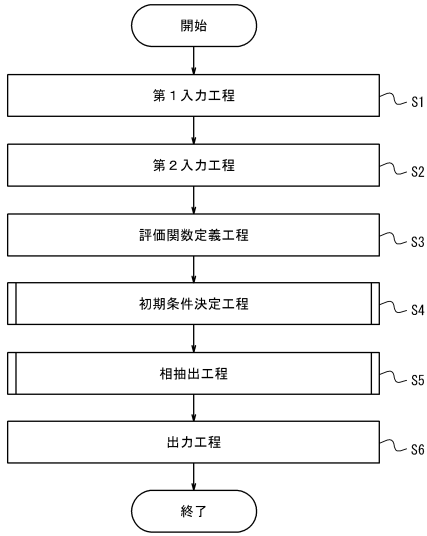
【 0 0 8 7 】

- 1 材料組織の相の抽出システム
- 1 0 材料組織の相の抽出装置
- 1 1 入力部
- 1 2 出力部
- 1 3 演算部
- 1 4 評価関数定義部
- 1 5 初期条件決定部
- 1 6 相抽出部
- 3 0 顕微鏡装置

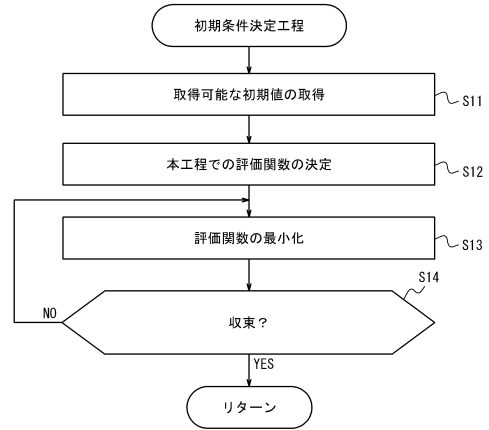
40

【図面】

【図 1】



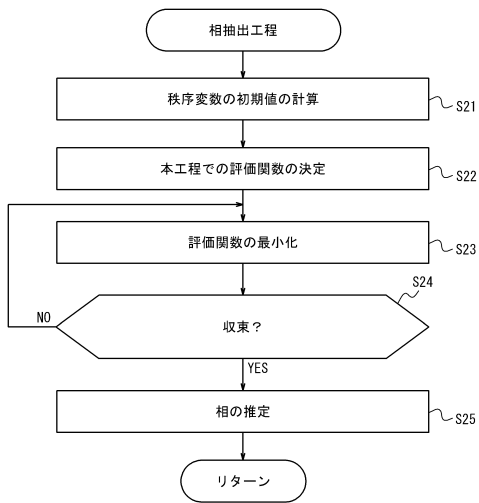
【図 2 A】



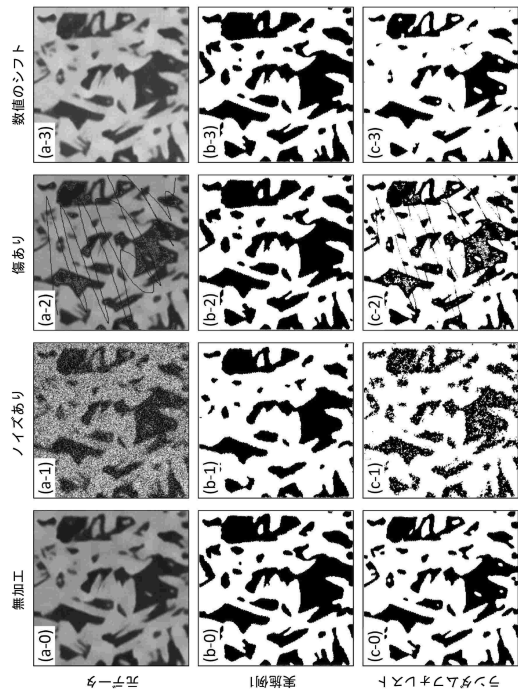
10

20

【図 2 B】



【図 3】

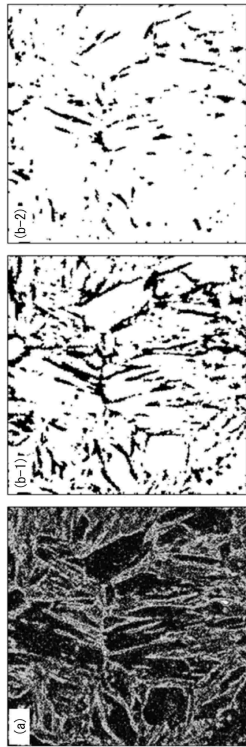


30

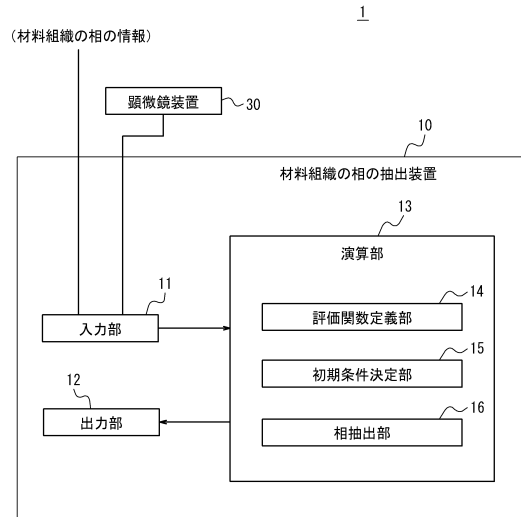
40

50

【 図 4 】



【 図 5 】



10

20

30

40

50

フロントページの続き

- 東京都千代田区内幸町二丁目2番3号 J F E スチール株式会社内
- (72)発明者 石川 伸
東京都千代田区内幸町二丁目2番3号 J F E スチール株式会社内
- 審査官 小澤 理
- (56)参考文献 特開2014-137344(JP,A)
特開昭63-274862(JP,A)
特開2014-048208(JP,A)
特開平05-333021(JP,A)
特開平05-093720(JP,A)
米国特許出願公開第2015/0125338(US,A1)
山中晃徳, 外, Multi-Phase-Field 法と均質化法による鉄鋼材料の力学特性予測, M & M2008
材料力学カンファレンス, 日本, 2008年, Vol.2008, No.OS0608, p.1-2, https://doi.org/10.1299/jsmemm.2008_OS0608-1
- (58)調査した分野 (Int.Cl., DB名)
G 0 1 N 3 3 / 2 0 4
G 0 2 B 2 1 / 0 0
J S T P l u s / J M E D P l u s / J S T 7 5 8 0 (J D r e a m I I I)
S c o p u s