

(19)日本国特許庁(JP)

(12)公開特許公報(A)

(11)公開番号

特開2022-166350

(P2022-166350A)

(43)公開日 令和4年11月2日(2022.11.2)

(51)国際特許分類

G 1 6 C 60/00 (2019.01)

F I

G 1 6 C 60/00

審査請求 未請求 請求項の数 12 O L (全17頁)

| | | | |
|----------|---------------------------|---------|--|
| (21)出願番号 | 特願2021-71500(P2021-71500) | (71)出願人 | 000005108 株式会社日立製作所 |
| (22)出願日 | 令和3年4月21日(2021.4.21) | (74)代理人 | 110001807弁理士法人磯野国際特許商標事務所 |
| | | (72)発明者 | 原 誉明 東京都千代田区丸の内一丁目6番6号 株式会社日立製作所内 |
| | | (72)発明者 | 神田 喬之 東京都千代田区丸の内一丁目6番6号 株式会社日立製作所内 |

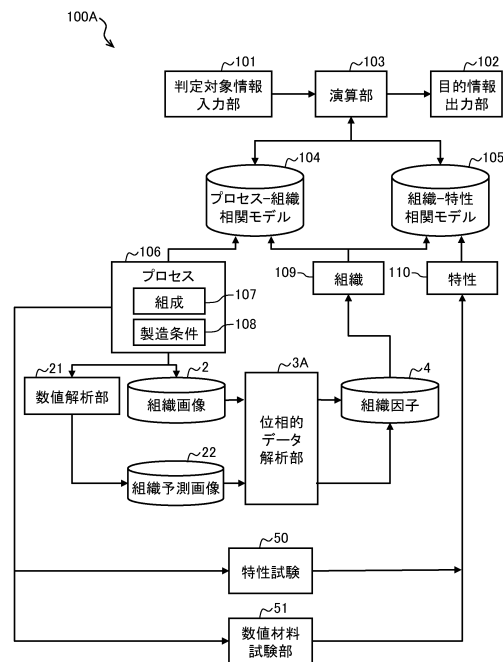
(54)【発明の名称】 材料プロセス探索装置、材料プロセス探索システム、および、関連モデル生成方法

(57)【要約】

【課題】様々な材料プロセス候補および要求特性に対して、それぞれ期待される材料特性および必要とされるプロセス条件を高精度に予測する。

【解決手段】材料プロセス探索装置100Aは、組成および製造条件を組み合わせたプロセス、並びに材料特性、材料組織画像に基づく材料組織の情報を格納するデータベースと、プロセスと材料組織との対応関係に基づくプロセス-組織関連モデル104を有するプロセス判定部と、材料組織と材料特性との対応関係に基づく組織-特性関連モデル105を有する特性判定部と、判定対象のプロセスより材料特性を算出するか、または判定対象の材料特性よりプロセスを算出する演算部103とを備える。

【選択図】図4



【特許請求の範囲】**【請求項 1】**

組成および製造条件を組み合わせたプロセス、並びに材料特性、材料組織画像に基づく組織の形態および分散度の指標を含む材料組織の情報を格納するデータベースと、
前記プロセスと前記材料組織との対応関係に基づく第一の相関モデルを有するプロセス判定部と、

前記材料組織と前記材料特性との対応関係に基づく第二の相関モデルを有する特性判定部と、

判定対象の前記プロセスより前記材料特性を算出するか、または判定対象の前記材料特性より前記プロセスを算出する演算部と、

を備えることを特徴とする材料プロセス探索装置。

10

【請求項 2】

前記材料組織画像の位相的データ解析を行って、前記第一の相関モデルと前記第二の相関モデルにおける前記材料組織の情報を取得する位相的データ解析部、

を備えることを特徴とする請求項 1 に記載の材料プロセス探索装置。

【請求項 3】

前記材料組織画像を数値解析によって生成する数値解析部を更に備え、

前記位相的データ解析部は、実験により取得した材料組織画像と前記数値解析部が生成した材料組織画像に基づき、前記材料組織の情報を取得する、

ことを特徴とする請求項 2 に記載の材料プロセス探索装置。

20

【請求項 4】

前記数値解析部は、所定のプロセスにより生成した材料の材料組織画像を内挿する他のプロセスにより生成される材料組織画像を数値解析によって生成する、

ことを特徴とする請求項 3 に記載の材料プロセス探索装置。

【請求項 5】

前記数値解析部は、所定のプロセスにより生成した材料の材料組織画像を外挿する他のプロセスにより生成される材料組織画像を数値解析によって生成する、

ことを特徴とする請求項 3 に記載の材料プロセス探索装置。

【請求項 6】

判定対象の前記プロセス、または判定対象の前記材料特性を判定対象情報として入力する判定対象情報入力部、

を備えることを特徴とする請求項 1 に記載の材料プロセス探索装置。

30

【請求項 7】

前記演算部が算出した判定対象の前記プロセス、または判定対象の前記材料特性を目的情報として出力する目的情報出力部、

を備えることを特徴とする請求項 1 に記載の材料プロセス探索装置。

【請求項 8】

前記プロセスの情報から数値材料試験により、前記プロセスによって生成される材料の特性を算出する数値材料試験部、

を備えることを特徴とする請求項 1 に記載の材料プロセス探索装置。

40

【請求項 9】

組成および製造条件を組み合わせたプロセス、並びに材料特性、材料組織画像に基づく組織の形態および分散度の指標を含む材料組織の情報を格納するデータベースと、

前記プロセスと前記材料組織との対応関係に基づく第一の相関モデルを有するプロセス判定部と、

前記材料組織と前記材料特性との対応関係に基づく第二の相関モデルを有する特性判定部と、

判定対象の前記プロセスより前記材料特性を算出するか、または判定対象の前記材料特性より前記プロセスを算出する演算部と、

を備えることを特徴とする材料プロセス探索システム。

50

【請求項 10】

数値解析部が、所定のプロセスにより生成される材料組織画像を数値解析によって生成するステップと、

位相的データ解析部が、数値解析によって生成された材料組織画像および他のプロセスで生成された材料を撮像した材料組織画像の位相的データ解析を行って、材料組織の情報を取得するステップと、

材料を生成したプロセスの因子と、前記材料に係る材料組織の情報との相関により相関モデルを生成するステップと、

を実行することを特徴とする相関モデル生成方法。

【請求項 11】

前記数値解析部は、撮像した材料を生成した他のプロセスを内挿するように、前記所定のプロセスを決定するステップ、

を実行することを特徴とする請求項 10 に記載の相関モデル生成方法。

【請求項 12】

前記数値解析部は、撮像した材料を生成した他のプロセスを外挿するように、前記所定のプロセスを決定するステップ、

を実行することを特徴とする請求項 10 に記載の相関モデル生成方法。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、材料のプロセス、組織および特性を結びつける相関モデルの生成方法、およびそれらを用いた材料プロセス探索装置、材料プロセス探索システムに関する。

【背景技術】

【0002】

近年、実験および計算により得られた材料データベースとデータマイニングなどの情報科学を融合することにより、要求仕様を満足する新材料や代替材料を効率的に探索するマテリアルズ・インフォマティクス (Materials Informatics: MI) という技術が研究開発されている。従来の MI では、主に組成によって決まる物質探索に重きがおかれているが、各物質は圧延や熱処理などの製造条件の影響で最終特性が変化する。そのため、組成と製造条件の組み合わせ (プロセス) が最終特性に対してどのように影響を与えるかを把握する事が求められる。

【0003】

特に、金属材料は特性のプロセス依存性が大きな材料として知られている。例えば、凝固時の冷却速度や熱処理の温度および保持時間の違いにより、金属材料の引張り強さや疲労強度などが大きく変化する。これらは、金属材料の組織がプロセスに応じて様々に変化することに由来しており、その結果として材料特性が変化している。

【0004】

プロセス依存性の大きな材料の探索システムには、組成や製造条件に加えて組織データを考慮するための様々なモデルが提案されている。特許文献 1 には、成分組成、製造条件および金属組織の状態を表す指標を含む入力情報と材料の特性値を含む出力情報とを管家付けた数理モデルを用いて、目標特性に対する最適な組成や製造条件を算出する方法が開示されている。

【先行技術文献】

【特許文献】

【0005】

【特許文献 1】特許第 6617842 号公報

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0006】

材料の組織情報は、組織の種類だけでなく、存在比率やサイズ、形態、分散度合いなど

10

20

30

40

50

様々な指標を有する。ある組織が一定比率存在している条件下でも、一定のサイズで均一に分散している場合と、不均一なサイズで特定箇所に固まって存在している場合では、材料特性が変化する。金属材料を溶融させるだけでなく、構造物の変形や内部組織変化に対しても影響を与える。従って、種類や割合などの統計的な指標だけでなく、個々の形態や分散度などを含む詳細な組織指標が重要である。

【0007】

組織の詳細情報を有するデータベースに基づいて、プロセスおよび特性との相関関係を相関モデルとして整理することができれば、相関モデルそのものの精度が向上し、材料プロセス探索の精度もともに向上する。

【0008】

しかし、プロセス依存性の大きな材料に対して様々な条件毎に、材料を試作してプロセス、組織、特性のデータを取得し、データベースとして蓄積しながら相関モデルを生成すると、多大な時間やコストがかかる。そのため、プロセスおよび組織の詳細情報を効率的に収集・定量化することができる技術が求められている。特許文献1に記載された技術によると、金属組織の状態を表す指標を含むデータに基づいて最適材料を探索する事ができる。しかし、考慮している材料組織は組織の種類および分率のみであり、形態などの詳細な組織情報は含まれていない。従って、これらの影響を加味した、高精度な相関モデルに基づく材料探索技術が望まれる。

【0009】

そこで、本発明は、材料組織の形態の指標に基づく高精度な相関モデルを高効率で生成し、この相関モデルを用いて最適な材料プロセスを探索することを課題とする。

【課題を解決するための手段】

【0010】

前記した課題を解決するため、本発明の材料プロセス探索装置は、組成および製造条件を組み合わせたプロセス、並びに材料特性、材料組織画像に基づく組織の形態および分散度の指標を含む材料組織の情報を格納するデータベースと、前記プロセスと前記材料組織との対応関係に基づく第一の相関モデルを有するプロセス判定部と、前記材料組織と前記材料特性との対応関係に基づく第二の相関モデルを有する特性判定部と、判定対象の前記プロセスより前記材料特性を算出するか、または判定対象の前記材料特性より前記プロセスを算出する演算部と、を備えることを特徴とする。

【0011】

本発明の材料プロセス探索システムは、組成および製造条件を組み合わせたプロセス、並びに材料特性、材料組織画像に基づく組織の形態および分散度の指標を含む材料組織の情報を格納するデータベースと、前記プロセスと前記材料組織との対応関係に基づく第一の相関モデルを有するプロセス判定部と、前記材料組織と前記材料特性との対応関係に基づく第二の相関モデルを有する特性判定部と、判定対象の前記プロセスより前記材料特性を算出するか、または判定対象の前記材料特性より前記プロセスを算出する演算部と、を備えることを特徴とする。

【0012】

本発明の相関モデル生成方法は、数値解析部が、材料を生成する所定のプロセスから材料組織の予測画像を数値解析によって生成するステップと、位相的データ解析部が、数値解析によって生成された材料組織の予測画像および他のプロセスで生成された材料を撮像した材料組織の実験画像の位相的データ解析を行って、材料組織の情報を取得するステップと、材料を生成した各プロセスの因子と、前記材料に係る材料組織の情報との相関により相関モデルを生成するステップと、を実行することを特徴とする。

その他の手段については、発明を実施するための形態のなかで説明する。

【発明の効果】

【0013】

本発明の材料プロセス探索装置、材料プロセス探索システム、および、相関モデル生成方法によれば、様々な材料プロセス候補および要求特性に対して、それぞれ期待される材

10

20

30

40

50

料特性および必要とされるプロセス条件を高精度に予測することができる。

【図面の簡単な説明】

【0014】

【図1】本発明の実施形態に係る材料プロセス探索装置における探索方法を示すフローチャートである。

【図2】材料プロセス探索装置の構成図である。

【図3】プロセス-組織関連モデルについて説明する図。

【図4】数値解析と位相的データ解析を活用した関連モデル生成方法および材料プロセス探索装置の構成を示す図である。

【図5A】合金の組織状態を走査電子顕微鏡で観察して得られた組織画像である。

10

【図5B】セグメンテーションした組織画像の例である。

【図5C】二値化した組織画像の例である。

【図5D】組織画像の0次のパーシステント図である。

【図6A】Cr基合金の凝固組織を実際の走査電子顕微鏡で撮影した実験画像である。

【図6B】Cr基合金の凝固組織の実験画像のパーシステント図である。

【図7A】Cr基合金の凝固組織の予測画像である。

【図7B】Cr基合金の凝固組織の予測画像のパーシステント図である。

【図8】材料組織の実験画像と予測画像を併用した関連モデル生成を示す図である。

【図9】関連モデル生成処理のフローチャートである。

【図10】実験の外挿領域に対して予測組織を用いて関連モデルを拡張可能であることを示す図である。

20

【図11】外挿による関連モデル生成処理のフローチャートである。

【発明を実施するための形態】

【0015】

以降、本発明を実施するための形態を、各図を参照して詳細に説明する。

本発明者らは、鋭意研究した結果、材料の組織形態の指標を考慮した関連モデルの生成方法を新たに見出した。本発明者らは、数値解析による材料組織予測と、位相的データ解析 (Topological Data Analysis: TDA) の組み合わせにより、プロセス依存の組織形態データを高効率に生成する方法と、組織形態を数値で表現する方法を発明した。更に本発明者らは、この組織形態の数値情報を関連モデルの構築に用いる方法を発明した。

30

以下、本発明の一実施形態に係る関連モデルの生成方法および材料プロセス探索装置について説明する。

【0016】

本実施形態に係る関連モデルの生成方法および材料プロセス探索装置は、材料のプロセス、組織構造、特性の相互関係である関連モデルを生成し、この関連モデルに基づき材料特性や材料プロセスを探索するものである。関連モデルにより、位相的データ解析による組織構造特徴量の数値表現により、数値解析による材料組織形態を予測することができる。材料プロセス探索装置は、関連モデルを用いて、最適な材料プロセスや期待される材料特性の予測値を求めるものである。

【0017】

40

これらの方法および装置は、数値解析で得られた予測組織から位相的データ解析で形態特徴量を抽出して、組織構造に関係する関連モデルのデータとして利用する事を特徴の一つとしている。

【0018】

本実施形態に係る関連モデルの生成方法および材料プロセス探索装置において、関連モデルの生成は、任意の材料の種類や、任意の製造プロセス毎に行うことができる。予測対象とする材料としては、その種類は、特に制限されるものではない。予測対象とする材料の具体例としては、金属材料が挙げられるが、金属材料以外の材料、例えば、樹脂材料やセラミックス等であってもよい。

【0019】

50

図 1 は、本発明の実施形態に係る材料プロセス探索装置 100 における探索方法を示す図である。

材料プロセス探索装置 100 は、判定対象情報入力部 101 と、目的情報出力部 102 と、演算部 103 と、プロセス - 組織関連モデル 104 と、組織 - 特性関連モデル 105 とを含む。材料プロセス探索装置 100 は更に、不図示のデータベースにプロセス 106、組織因子 4 とそれを含む組織 109、特性 110、組織画像 2 を格納する。

【0020】

プロセス - 組織関連モデル 104 は、プロセスと材料組織との対応関係に基づく第一の関連モデルである。プロセス - 組織関連モデル 104 では、対象とする材料のプロセス 106 と、そのプロセス 106 によって形成される材料の組織 109 との対応関係が示されている。このプロセス - 組織関連モデル 104 は、プロセス 106 と組織 109 との対応関係を、回帰分析や機械学習によって推定した結果である。ユーザがプロセス 106 で生成された材料の組織画像 2 を取得し、この組織画像 2 の特徴量を抽出することで、組織 109 を構成する組織因子 4 が得られる。プロセス - 組織関連モデル 104 と演算部 103 の組み合わせにより、プロセス因子と組織因子との対応を判定するプロセス判定部が具現化される。

10

【0021】

組織 - 特性関連モデル 105 は、材料組織と材料特性との対応関係に基づく第二の関連モデルである。組織 - 特性関連モデル 105 では、対象とする材料の組織 109 と、その材料の特性 110 との対応関係が示されている。ユーザが、プロセス 106 で生成された材料に対して、特性試験 50 を実施することで、材料の特性 110 を得ることができる。この組織 - 特性関連モデル 105 と演算部 103 の組み合わせにより、特性と組織因子との対応を判定する特性判定部が具現化される。

20

【0022】

はじめに、材料プロセス探索に用いる各関連モデルについて説明する。

プロセス - 組織関連モデル 104 では、対象とする材料のプロセス 106 と、そのプロセス 106 によって形成される材料の組織 109 との対応関係が示されている。プロセス 106 は、材料の組成 107 および材料の製造条件 108 で構成される。組成 107 は、例えば金属材料における構成元素濃度や、複合材料であれば母材と添加剤の割合などである。また、製造条件 108 は、材料の状態に変化を与える条件であって、金属材料の凝固過程における冷却速度や、鍛造工程でのひずみ速度、熱処理工程での保持温度や保持時間などである。

30

【0023】

材料の組織画像 2 は、例えば金属材料において光学顕微鏡 (Optical Microscope : OM) や走査型電子顕微鏡 (Scanning Electron Microscope : SEM) などで観察される結晶組織の画像である。この組織画像 2 の特徴量を抽出したものが組織因子 4 である。組織 109 は、組織因子 4 によって構成される。プロセス 106 に応じて組織 109 は変化するため、プロセス 106 と組織 109 の対応関係をプロセス - 組織関連モデル 104 として定義する事ができる。

【0024】

組織 109 と特性 110 の対応関係である組織 - 特性関連モデル 105 も、プロセス - 組織関連モデル 104 と同様に、組織因子と特性との関係性を回帰分析などで検証する事で定義できる。これにより、組織因子から特性を予測したり、要求特性からあるべき組織因子を推定したりする事ができる。

40

【0025】

図 2 は、材料プロセス探索装置 100 のハードウェア構成図である。

入力装置 801 は、入力されたデータを記憶する装置であり、ユーザにより入力された、判定対象の材料のプロセス 106、組織 109、特性 110 の情報等が記憶される。入力装置 801 は、例えば、キーボード、マウス、タッチパッド、トラックボール等によって構成することができる。この入力装置 801 により、判定対象情報入力部 101 の機能

50

部が具現化される

【0026】

記憶装置804は、例えば、RAM(Random Access Memory)、ROM(Read Only Memory)、フラッシュメモリ、ハードディスク、光ディスク等によって構成することができる。記憶装置804は、その一部又は全部が、計算機802と一体に設けられてもよい。この記憶装置804には、プロセス-組織相関モデル104や、組織-特性相関モデル105を始めとして、プロセス106、組織109、特性110、組織画像2、組織因子4などの各種情報や、計算機802に材料プロセス探索処理を実行させるためのプログラムなどが格納されている

【0027】

計算機802は、入力されたデータを用いて数値解析を行う装置であり、図1の演算部103を具現化するものである。計算機802は、所定の計算プログラムを実行することにより、入力された材料データや、予め用意された相関モデル等を読み出し、これらを用いた計算処理を実行して、判定対象材料のプロセス106、組織109、特性110の予測値を算出する。

【0028】

なお、計算機802は、数値解析に用いる所定の計算プログラムを演算回路に直接組み込んだ装置であってもよいし、外部に記憶されている所定の計算プログラムを読み込んで実行する装置であってもよい。また、計算機802は、表示処理等の各種処理を実行する機能を備えてもよい。

【0029】

計算機802は、例えば、集積回路等の演算回路、メモリやレジスタが組み込まれたCPU(Central Processing Unit)等の各種の計算装置によって構成することができる。

【0030】

表示装置803は、計算機802が求めた結果を表示する装置であり、計算機802が算出した材料のプロセス106、組織109、特性110の予測値を、数値自体の表示、数値に対応した色やテクスチャ等の分布表示等として、ユーザに表示する。

【0031】

表示装置803は、例えば、液晶ディスプレイ、プラズマディスプレイ、有機ELディスプレイ、ブラウン管等によって構成されており、計算機802と組み合わせて、目的情報出力部102を具現化する。

【0032】

図3は、プロセス-組織相関モデル104について説明するグラフである。

グラフの縦軸は、或る材料の組織因子4の析出相サイズを表し、グラフの横軸は、この材料を生成する際のプロセス106の因子である冷却速度を表す。例えば金属材料の凝固過程において、冷却速度の大きな急冷条件において析出相のサイズが微細化する傾向が観察される。プロセス因子-組織因子対応関係201は、異なる冷却速度での凝固条件と、各条件で得られた凝固組織を光学顕微鏡や走査電子顕微鏡で観察した析出相サイズをプロットしたものである。これら複数の組織因子とプロセス因子の対応関係に基づき、回帰分析を行う事で、回帰曲線202が得られる。回帰曲線202は、プロセス-組織相関モデル104の一例である。プロセス-組織相関モデル104が決まると、プロセス-組織相関モデル104の回帰曲線202から、あるプロセス因子を仮定したときに想定される組織因子が求められる。また、組織因子からプロセス因子を推定することも可能になる。

【0033】

なお、相関モデルとして結びつけるプロセス因子および組織因子はそれぞれ一つずつに限らない。複数のプロセス因子と一つの組織因子の対応関係や、複数の組織因子と一つのプロセス因子の対応関係であってもよく、複数の組織因子と複数のプロセス因子の対応関係でもよい。更に、対応関係は誤差範囲を含んでもよく、例えばあるプロセス因子に対して、想定される組織因子が一定の幅に入る、または、ある値より大きくなる(小さくなる

10

20

30

40

50

)、というものでよい。更に、プロセス因子と組織因子の対応関係の導出は、回帰分析に限らず、機械学習や深層学習などを活用してもよい。

【0034】

図1に戻り説明を続ける。判定対象情報入力部101では、対象とする材料の情報の入力を受け付ける。プロセスから特性を探索する場合は対象のプロセス情報を入力し、特性からプロセスを探索する場合は特性情報を入力する。

【0035】

演算部103は、判定対象情報に対応する目的情報を出力する。この演算部103は、判定対象のプロセスより目的である材料特性を算出するか、または判定対象の材料特性より目的であるプロセスを算出する。演算部103は、入力された材料情報と事前に定義された相関モデルに基づき、入力情報と対応づけられる組織因子4を同定する。

10

【0036】

例えば、特性からプロセス106を探索する場合、演算部103は、組織-特性相関モデル105に基づき、判定対象情報入力部101にて入力された材料の特性に対応する組織因子4を同定する。次に、演算部103は、プロセス-組織相関モデル104に基づき、同定された組織因子4に対応するプロセス106を決定する。これらの手続きにより、判定対象情報入力部101で入力された材料の特性に対応するプロセス106の情報が得られる。

【0037】

また、プロセスから特性110を探索する場合、演算部103は、プロセス-組織相関モデル104に基づき、判定対象情報入力部101にて入力された材料のプロセスに対応する組織因子4を同定する。次に、演算部103は、組織-特性相関モデル105に基づき、同定された組織因子4に対応するプロセス106を決定する。これらの手続きにより、判定対象情報入力部101で入力された材料のプロセスに対応する材料の特性110の情報が得られる。

20

【0038】

目的情報出力部102は、演算部103によって探索した結果として得られたプロセスまたは材料の特性を出力する。なお、目的情報出力部102は、演算の途中段階で同定された組織因子を含めて出力してもよい。

【0039】

また、判定対象情報入力部101は、組織因子の入力を受け付けてもよい。演算部103は、入力された材料情報と事前に定義された相関モデルに基づき、入力情報と対応づけられる組織因子を同定する。例えば、組織因子からプロセス106を探索する場合、演算部103は、プロセス-組織相関モデル104に基づき、判定対象情報入力部101にて入力された材料の組織因子4に対応するプロセス106を決定する。これらの手続きにより、演算部103は、判定対象情報入力部101で入力された材料の特性に対応するプロセス106の情報が得られる。

30

【0040】

プロセス-組織相関モデル104を生成するために必要なプロセス因子を取得するには、材料の合成や製造・加工工程をモニタリングする必要がある。例えば金属材料では、原料として投入した構成元素の濃度が溶融中に蒸発して減少したり、凝固過程で偏析したりすることで不均一な分布になることがある。また、凝固過程で鑄造する体積が大きい場合には、場所によって冷却速度が変わることがあり、事前に設定した冷却速度と異なる場合がある。そのため、組織を観察する場所ごとに組成や製造条件を確認する必要があり、プロセス因子を取得するには多大なコストが要求される。

40

【0041】

組織因子4には、一般的に析出相サイズや、結晶相の面積率などが用いられる。しかし、存在比率が同じであっても、系全体に均一に分散している場合と、場所によって疎密が生じている場合では、組織の状態が同じであるとは言えない。また、組織の形態が球状か、針状か、枝分かれしているか、などは、界面強度や濃度偏析に影響する。そのため、組

50

織の形態も材料特性に影響する事が知られている。このような組織の分散状態や形態は数値による定量評価が困難であり、相関モデル生成のための組織因子として積極的に活用されていない。

【0042】

本発明者らが鋭意研究した結果、数値解析による材料組織予測技術と、位相的データ解析を用いた組織の形態や分散度を含む特徴量の抽出を組み合わせることにより、組織形態および分散度の因子を考慮した相関モデルを高効率に生成し、かつ高精度化する事が可能である事を見出した。

【0043】

図4は、数値解析と位相的データ解析を活用した相関モデル生成方法および材料プロセス探索装置100Aの構成を示す図である。 10

材料プロセス探索装置100Aは、図1に示した材料プロセス探索装置100に加えて更に、数値解析部21と、位相的データ解析部3Aと、数値材料試験部51とを含み、組織予測画像22を格納している。

【0044】

従来の組織画像2は、光学顕微鏡や走査電子顕微鏡を用いて実験的に観察することで取得（撮像）されていた。これに対して数値解析部21は、材料を生成する所定のプロセスを入力として、数値解析により、このプロセスで生成される材料の組織を予測する組織予測画像22を生成する。これにより実験よりも容易かつ大量に、組織予測画像を生成することができる。 20

【0045】

位相的データ解析部3Aは、組織画像2や組織予測画像22に対して位相的データ解析を行って、組織因子4を取得する。これにより位相的データ解析部3Aは、組織のサイズや存在比率だけにとどまらず、従来では数値化が困難であった組織の形態や分散度の指標を組織因子4に含ませることができる。位相的データ解析部3Aが取得した組織因子4は、組織-特性相関モデル105やプロセス-組織相関モデル104の生成に用いられる。

【0046】

位相的データ解析部3Aは、例えばパーシステントホモロジーを用いた材料組織の特徴量解析を適用する。位相的データ解析部3Aは、パーシステントホモロジーに限らず、位相的データ解析が可能な任意の解析手段を用いてよい。 30

【0047】

数値材料試験部51は、プロセス106の情報に対して数値材料試験を行うことで、このプロセス106で生成される材料の特性110を得るものである。

【0048】

図5Aから図5Dは、材料組織画像から組織の特徴因子を抽出する一連の流れを示す図である。

図5Aは、合金の組織状態を走査電子顕微鏡などで観察して撮像された組織画像である。

組織画像には、複数の結晶相が混在している場合が多い。そのため、ユーザは、色調や明度などを指標としてどの部位がどの結晶相に対応しているかを分類する作業（セグメンテーション）を行う。 40

【0049】

図5Bは、セグメンテーションした組織画像の例である。ここで組織画像は、例えばA相とB相とC相の3つのうち何れかに分類される。

最も濃い輝度で示される部位23は、A相に分類される。やや薄い輝度の部位24は、B相に分類される。白色の部位25は、C相に分類される。このようなセグメンテーションは、対象材料に知見のある作業者が経験をもとに実施してもよく、また、機械学習などで生成した分類モデルを適用することで実施してもよい。

【0050】

次に、セグメンテーション済みの画像から、評価の対象とする相を抽出して二値化を行 50

う。ここではA相を評価対象として、A相に対応する部位を白く、その他の部位を黒く塗りつぶした二値化画像としている。

【0051】

図5Cは、二値化した組織画像の例である。

二値化した組織画像に対してパーシステントホモロジー解析を実施すると、0次のパーシステント図が得られる。これは組織の連結成分や島構造を可視化したものである。

【0052】

図5Dにおけるパーシステント図は、二値化画像の評価対象領域（白い領域）を穴とみなして、穴の周囲のピクセルを逐次的に増減させていた時の穴の生成および消滅のステップをプロットしたものである。パーシステント図の横軸は、穴の生成するタイミングを示すbirth軸である。パーシステント図の縦軸は、穴が周囲の穴と結合して消滅するタイミングを示すdeath軸である。

【0053】

元画像の状態をbirthおよびdeathが0のステップと定義して、ステップを巻き戻しながら(0 - 1 - 2 ···)、穴の外周からピクセルを一つずつ削除していくと、あるタイミングで穴が消滅する。従って、負のステップ値からステップを増加させていくと、対象とする穴が生成するステップを求めることができる。この時のステップ値をbirth軸にプロットする。

【0054】

更にステップを増加させるとともに穴の外周にピクセルを一つずつ追加して穴の領域を拡大していくと、周囲の穴も領域が拡大することに伴い、あるステップで対象とする穴が最近接の穴と結合するステップが求められる。このステップを穴の消滅のステップとして、death軸にプロットする。

【0055】

このように定義して生成したパーシステント図では、death軸が正の領域にプロットされる穴は孤立粒子、death軸が負の領域にプロットされる穴は連結した粒子に相当する。また、孤立粒子においては、death軸の絶対値が大きくなるほど粒子間隔が広い状態を示し、birth軸の絶対値が大きくなるほど粒子サイズが大きい状態を示す。一方、death軸が負の領域にプロットされる穴は、連結した粒子に相当し、プロット位置によって凹凸の大きさや、太さなどの違いが表現される。

【0056】

パーシステント図において、プロット頻度の高い領域は、その組織の主要な特徴を示している。従って、例えばパーシステント図における重心位置などの特徴点は、対象とする材料の組織因子4の特徴量として利用することができる。前記の通り、パーシステント図における各種特徴点は従来の組織評価因子では数値表現が困難であった組織の形態や分散状態を示している。これらの組織因子4を組織109の情報としてプロセス-組織相関モデル104および組織-特性相関モデル105を生成することで、新たな説明因子が加わり、相関モデルの精度が向上する。

【0057】

組織画像については、光学顕微鏡や走査電子顕微鏡などにより実際に観察した組織画像に限らず、数値解析により生成した組織予測画像を併用することが可能である。例えば、フェーズフィールド法を用いて対象プロセスをシミュレーション上で再現することで、仮想的に組織画像を生成することができる。また、組織画像の生成は、フェーズフィールド法に限らず、モンテカルロ法やセルオートマトン法など、任意の組織形成予測方法を用いてよい。

【0058】

フェーズフィールド法は、対象材料のプロセス（組成および温度履歴）を定義して、その条件下における材料の組織形成過程を数値解析によって導出する方法である。従って、評価対象の材料組織と、それを形成したプロセスの対応関係が事前に明らかになっている。これは、実験によりプロセス情報を収集する際の多大なコストを簡略化することにつな

10

20

30

40

50

がり、相関モデルを効率よく生成することが可能である。

【0059】

更に、フェーズフィールド法では、個々の結晶組織に対して異なる変数が割り当てられている。つまり、計算で得られた組織画像に対して、どの部位がどの結晶相に対応しているかが、変数の違いによって明示されている。そのため、セグメンテーションにかかる工数が大幅に削減可能である。実験観察で得られる組織画像のセグメンテーションでは、例えば経験者の知見による分類では、見落としや誤った判断によるセグメンテーション精度の低下が少なからず存在する。セグメンテーション精度向上のために、高品質な観察画像を用意する場合には、エッチングや研磨条件の最適化、高倍率での測定などが必要であり、多大な工数が必要である。実験画像に加えて数値解析による組織予測画像を用いること

10

【0060】

図6Aは、Cr基合金の凝固組織を実際の走査電子顕微鏡で撮影した実験画像である。図6Bは、この実験画像のパーシステント図である。図6Aに示す白黒の二値化画像において、白い部分が炭化物相に相当する。

【0061】

図7Aは、Cr基合金の凝固組織の予測画像である。図7Bは、この予測画像のパーシステント図である。図7Aに示す白黒の二値化画像において、白い部分が炭化物相に相当する。

20

【0062】

図6Aの実験画像と図7Aの予測画像を比較すると、分散粒子状態の炭化物や、針状に伸びた炭化物など、組織の形態やサイズ、分布状態は実験画像と予測画像で近い状態にあることが分かる。ここでは、両者に対してパーシステントホモロジー解析を実施してパーシステント図で比較している。パーシステント図で表現することで、プロットの多い領域や、プロット全体の広がりなどを数値的に比較することができる。

【0063】

主要な組織特徴点として、例えば連結粒子の状態を表す、death軸が負となる下部領域の重心(下部重心)に注目する。図6Bの実験画像のパーシステント図の重心座標(birth, death)が(-96, -21)であるのに対して、図7Bの予測画像のパーシステント図の重心座標は(-95, -30)となり、よく一致している。

30

数値解析で再現可能な組織因子に基づいて相関モデルを整理すれば、実験画像と予測画像を統合することが可能になる。

【0064】

図8は、材料組織の実験画像と予測画像を併用した相関モデル生成を示すグラフである。

グラフの縦軸は、組織因子のうち何れかである。グラフの横軸は、プロセス因子のうち何れかである。円形のプロットは、実験で得られたプロセス因子-組織因子対応関係601である。三角形のプロットは、数値解析で実験結果の再現性を検証したプロセス因子-組織因子対応関係602と実験で検証していない領域に対して前記検証済みの数値解析モデルで予測したプロセス因子-組織因子対応関係603である。破線は、プロセス因子-組織因子対応関係601~603に基づいて算出した回帰曲線604である。

40

【0065】

実験で得られたプロセス因子-組織因子対応関係601に加えて、数値解析で実験結果の再現性を検証したプロセス因子-組織因子対応関係602、および、実験で検証していない領域に対して前記検証済みの数値解析モデルで予測したプロセス因子-組織因子対応関係603を用いて回帰分析などを行うことで、実験結果のみに基づいて作成した回帰曲線よりも高精度な回帰曲線604が得られる。

【0066】

図9は、相関モデル生成処理のフローチャートである。

50

最初、演算部 103 は、実験画像のプロセス因子を内挿するプロセス因子を決定する（ステップ S10）。数値解析部 21 は、演算部 103 が決定したプロセス因子から生成される材料の組織の予測画像を生成する（ステップ S11）。

次に位相的データ解析部 3A は、生成した予測画像と実験画像の位相的データ解析により、材料組織の情報を取得する（ステップ S12）。そして、演算部 103 は、材料を生成する各プロセス因子と材料組織の情報の相関によりプロセス - 組織相関モデル 104 を生成すると（ステップ S13）、図 9 の処理を終了する。

【0067】

図 10 は、実験の外挿領域に対して予測した組織画像を用いて相関モデルを拡張可能であることを示すグラフである。

10

グラフの縦軸は、組織因子のうち何れかである。グラフの横軸は、プロセス因子のうち何れかである。円形のプロットは、実験で確認したプロセス因子 - 組織因子対応関係 701 である。三角形のプロットは、数値解析で内挿補間したプロセス因子 - 組織因子対応関係 702 である。粗い破線は、実験データおよび内挿領域の数値解析データに基づいた回帰曲線 704 である。正方形のプロットは、これまで実験で確認してこなかった外挿領域でのプロセス因子 - 組織因子対応関係 703 であり、細かい破線は、実験データおよび内挿領域の数値解析データに加えて、外挿領域の数値解析データを併用した回帰曲線 705 である。

【0068】

図 10 は、実験的に検証したプロセス因子の領域の外側（外挿領域）に対しても予測画像の組織因子を用いることで、相関モデルを拡張可能であることを示している。実験で確認したプロセス因子 - 組織因子対応関係 701 および数値解析で内挿補間したプロセス因子 - 組織因子対応関係 702 に加えて、これまで実験で確認してこなかった外挿領域でのプロセス因子 - 組織因子対応関係 703 についても数値解析でデータ生成が可能であり、相関モデル生成のためのデータとして活用することができる。実験データおよび内挿領域の数値解析データに基づいた回帰曲線 704 に比較して、外挿領域の数値解析データを併用した回帰曲線 705 は、外挿領域の材料プロセス探索において高精度な相関モデルとして利用することができる。

20

【0069】

図 11 は、相関モデル生成処理のフローチャートである。

30

最初、演算部 103 は、実験画像のプロセス因子を外挿または内挿するプロセス因子を決定する（ステップ S10A）。以降の処理は、図 9 で示したステップ S11 ~ S13 の処理と同様である。

【0070】

（変形例）

本発明は上記した実施形態に限定されるものではなく、様々な変形例が含まれる。例えば上記した実施形態は、本発明を分かりやすく説明するために詳細に説明したものであり、必ずしも説明した全ての構成を備えるものに限定されるものではない。ある実施形態の構成の一部を他の実施形態の構成に置き換えることが可能であり、ある実施形態の構成に他の実施形態の構成を加えることも可能である。また、各実施形態の構成の一部について、他の構成の追加・削除・置換をすることも可能である。

40

【0071】

上記の各構成、機能、処理部、処理手段などは、それらの一部または全部を、例えば集積回路などのハードウェアで実現してもよい。上記の各構成、機能などは、プロセッサがそれぞれの機能を実現するプログラムを解釈して実行することにより、ソフトウェアで実現してもよい。各機能を実現するプログラム、テーブル、ファイルなどの情報は、メモリ、ハードディスク、SSD (Solid State Drive) などの記録装置、または、フラッシュメモリカード、DVD (Digital Versatile Disk) などの記録媒体に置くことができる。

【0072】

50

各実施形態に於いて、制御線や情報線は、説明上必要と考えられるものを示しており、製品上必ずしも全ての制御線や情報線を示しているとは限らない。実際には、殆ど全ての構成が相互に接続されていると考えてもよい。

本発明の変形例として、例えば、次の(a), (b)のようなものがある。

【0073】

(a) 本発明は、単一の計算機として実装された材料プロセス探索装置100, 100Aに限定されず、複数の装置が連携して材料プロセスを探索する材料プロセス探索システムとして実装してもよい。

【0074】

(b) 数値材料試験部51が、プロセス因子と特性との対応関係の実験データを内挿または外挿するように、プロセス因子からこの材料の特性情報を算出してもよい。これにより、組織-特性相関モデル105を高効率に作成可能である。 10

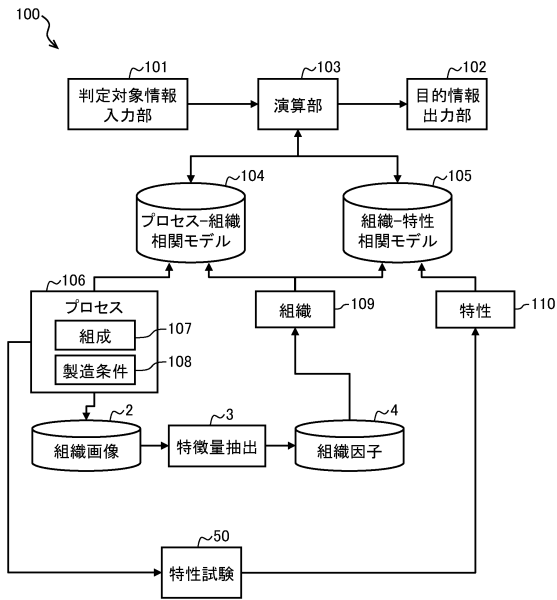
【符号の説明】

【0075】

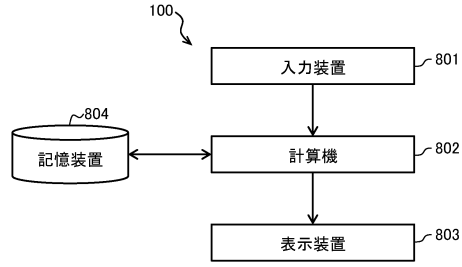
| | | |
|------------------|-----------------|----|
| 100 | 材料プロセス探索装置 | |
| 101 | 判定対象情報入力部 | |
| 102 | 目的情報出力部 | |
| 103 | 演算部 | |
| 104 | プロセス-組織相関モデル | |
| 105 | 組織-特性相関モデル | 20 |
| 106 | プロセス | |
| 107 | 組成 | |
| 108 | 製造条件 | |
| 109 | 組織 | |
| 110 | 特性 | |
| 2 | 組織画像 | |
| 21 | 数値解析部 | |
| 22 | 組織予測画像 | |
| 23~25 | 部位 | |
| 3 | 特徴量抽出 | 30 |
| 3A | 位相的データ解析部 | |
| 4 | 組織因子 | |
| 50 | 特性試験 | |
| 51 | 数値材料試験部 | |
| 201 | プロセス因子-組織因子対応関係 | |
| 202 | 回帰曲線 | |
| 601~603, 701~703 | プロセス因子-組織因子対応関係 | |
| 604, 704, 705 | 回帰曲線 | |
| 801 | 入力装置 | |
| 802 | 計算機 | 40 |
| 803 | 表示装置 | |
| 804 | 記憶装置 | |

【 図 面 】

【 図 1 】



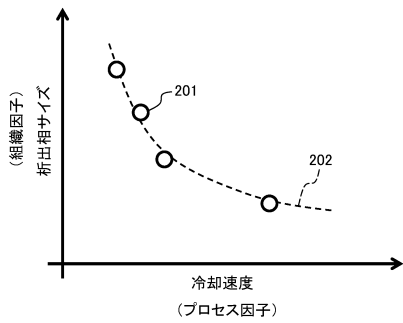
【 図 2 】



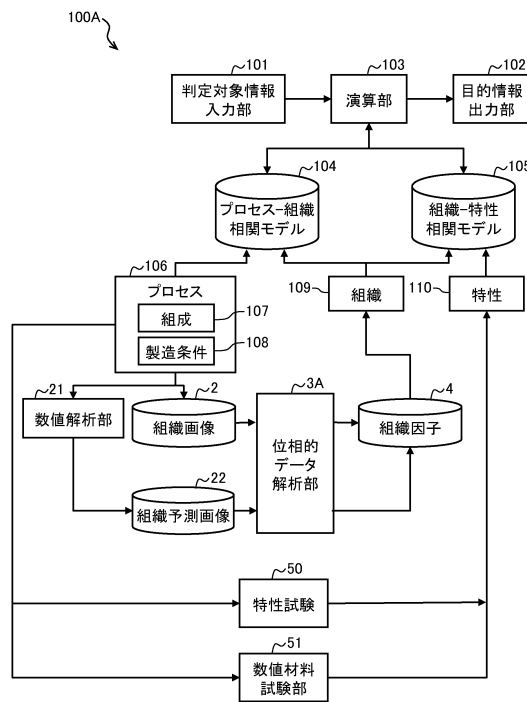
10

20

【 図 3 】



【 図 4 】



30

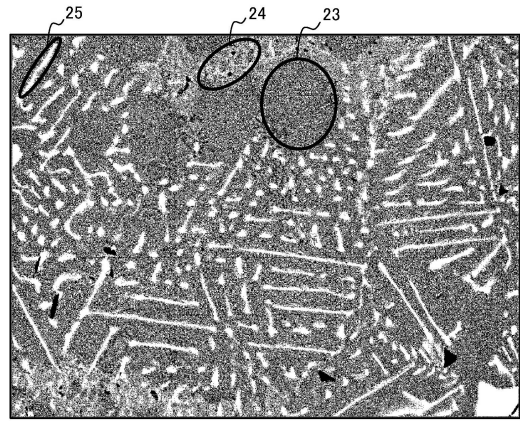
40

50

【 図 5 A 】



【 図 5 B 】

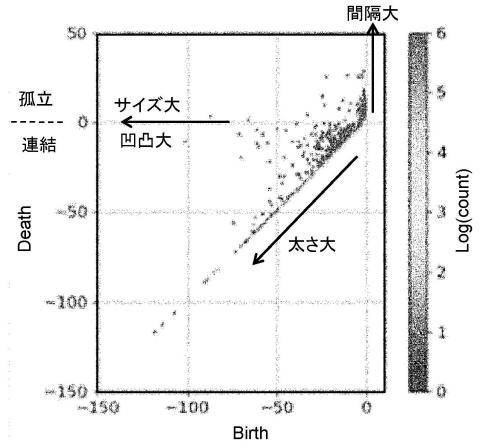


10

【 図 5 C 】



【 図 5 D 】



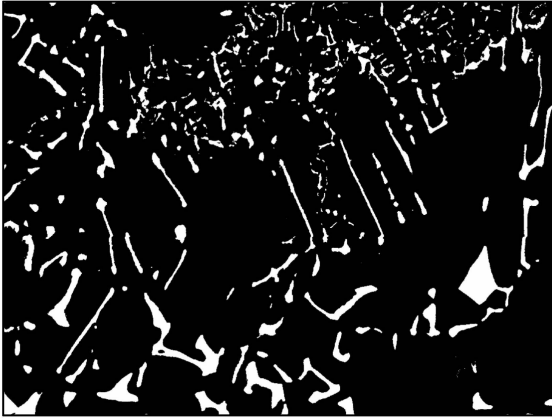
20

30

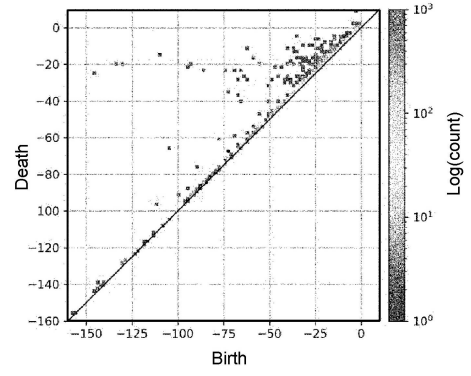
40

50

【 6 A 】



【 6 B 】

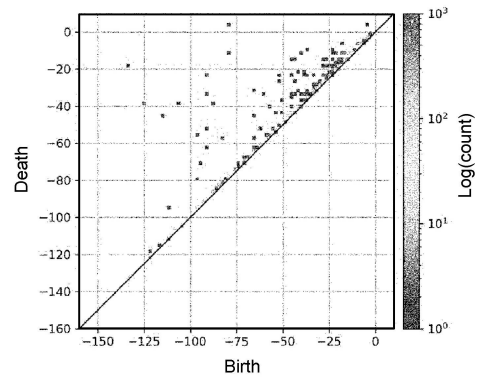


10

【 7 A 】



【 7 B 】



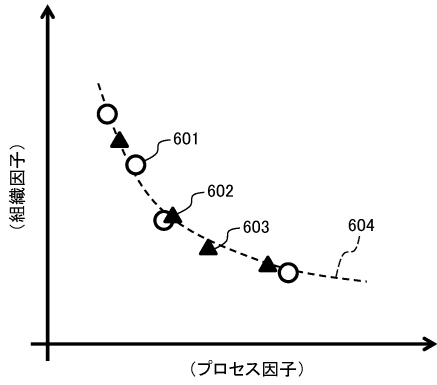
20

30

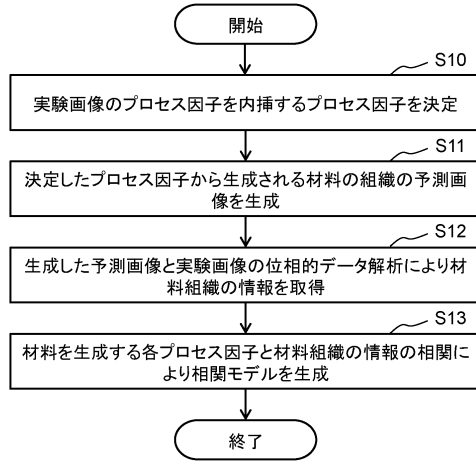
40

50

【図 8】

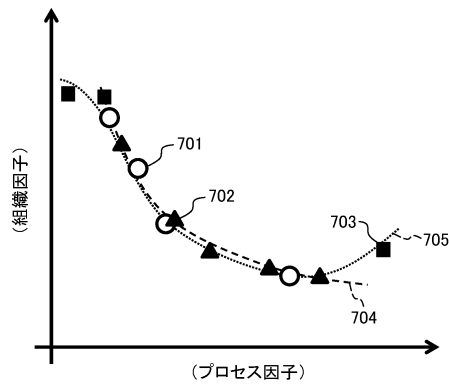


【図 9】

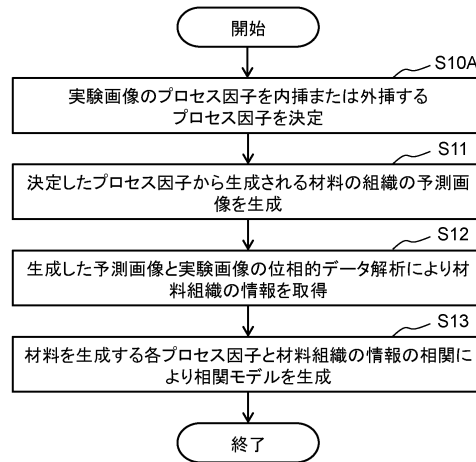


10

【図 10】



【図 11】



20

30

40

50