

技術資料

Technical Data

機械学習を用いたオーステナイト結晶粒径計測精度に寄与する前処理手法の開発

児嶋 彬^{*1}, 本田百花^{*1}, 岡島琢磨^{*2}

Development of Preprocessing Method Contributing to the Accuracy of Austenite Grain Size Measurement Using Machine Learning

Akira KOJIMA, Momoka HONDA and Takuma OKAJIMA

Synopsis

To analyze the process of microstructural change, it is essential to observe the microstructure and measure grain size. However, conventional microstructure observation methods can only obtain representative grain sizes in the microstructure image. For more advanced microstructure control, it is necessary to measure all grains in the image and evaluate them, including evaluation of grain size distribution. One method of doing this is to create an image with grain boundary markings corresponding to the optical micrographs and measure the grain boundaries. However, marking grain boundaries is a time-consuming manual process. In this study, we developed a preprocessing method that contributes to the accuracy of austenite grain size measurement using machine learning. By enlarging the grain boundary inward and applying a gradient to the pixel value from the start of the enlargement to the end of the enlargement, the interruption of the grain boundary is suppressed in the inference after machine learning, resulting in highly accurate grain size measurement. Using this method, we analyzed optical micrographs of Alloy925 and found that the absolute error for both the number of grains and grain size was less than 5%.

1. 緒言

近年、カーボンニュートラル社会の実現を目指し、従来の化石燃料に代わる新燃料として水素やバイオマスを利用し、電気エネルギーを生産するガスタービンや、自動車用内燃機関を改良する研究開発がますます盛んになってきている。これらの高温環境下で使用される部材には、耐熱性に優れた超合金が適用¹⁾されており、新燃料利用の変革によって今後も利用されると予想される。これらの超合金が適切な各種の材料特性を発揮するためには、その製造プロセスにおいて結晶粒径をはじめとする組織制御技術が非常に重要である。大同特

殊鋼(株) (以下、当社という) では、デジタルエンジニアリングシステム DAINUS[®] (DAIDo NUmerical process engineering System) を開発し、実際の圧延や鍛造プロセスにおける組織制御の最適化設計手法を実用化²⁾した。さらに実際の製造プロセスの加工熱履歴を再現し、組織と特性予測を実現する創質加工シミュレータ³⁾を開発した。これらの予測精度を担保するため、材料の物性値や変形抵抗、再結晶や粒成長挙動の構成式といったデータベースの構築も非常に重要である。

材料の再結晶や粒成長挙動の調査には、非常に多数のマイクロ組織観察を行い、再結晶分率や結晶粒径を測定することが必要である。光学顕微鏡写真を用いた結晶粒径

2023年10月2日 受付

* 1 大同特殊鋼(株)技術開発研究所 (Corporate Research & Development Center, Daido Steel Co., Ltd.)

* 2 大同特殊鋼(株)技術開発研究所, 工博 (Dr. Eng., Corporate Research & Development Center, Daido Steel Co., Ltd.)

の定量化には比較法や切断法があるが、平均的な結晶粒径や粒度番号の情報までしか得ることができず、材料の品質に影響を与える結晶粒径の分布の情報を得ることができない⁴⁾。今後、より高度な組織制御システムを構築するためには、光学顕微鏡写真内のすべての結晶粒径の測定を行い、結晶粒径分布まで容易に定量化できる手法が必要である。金属結晶学に基づいたより正確な粒径分布の測定には、EBSD（電子線後方散乱回折法）による分析が望ましいが、非常に高価であり分析時間も要するため、大量の計測・分析にはあまり適していない。

そこで Fig. 1 のように光学顕微鏡写真に対応した、粒界部分をマーキングした画像を作成し、粒界に囲まれた領域を粒として測定することで、個別の粒径を算出する方法を選択した。この方法は結晶粒径の分布を考慮に入れた品質予測に応用できる可能性がある。しかしながら、粒界部分のマーキングには、粒界の濃淡、粒内の双晶、析出物、研磨疵の存在により、画像処理によって粒界だけを検出することは難しい。そのため、熟練した作

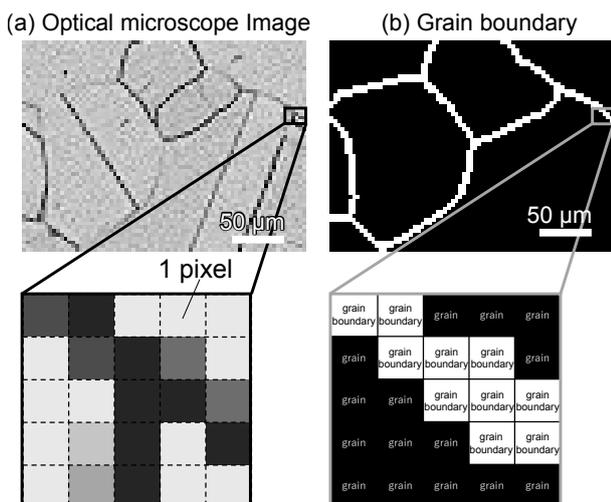


Fig. 1. Microstructural image and grain boundary image.

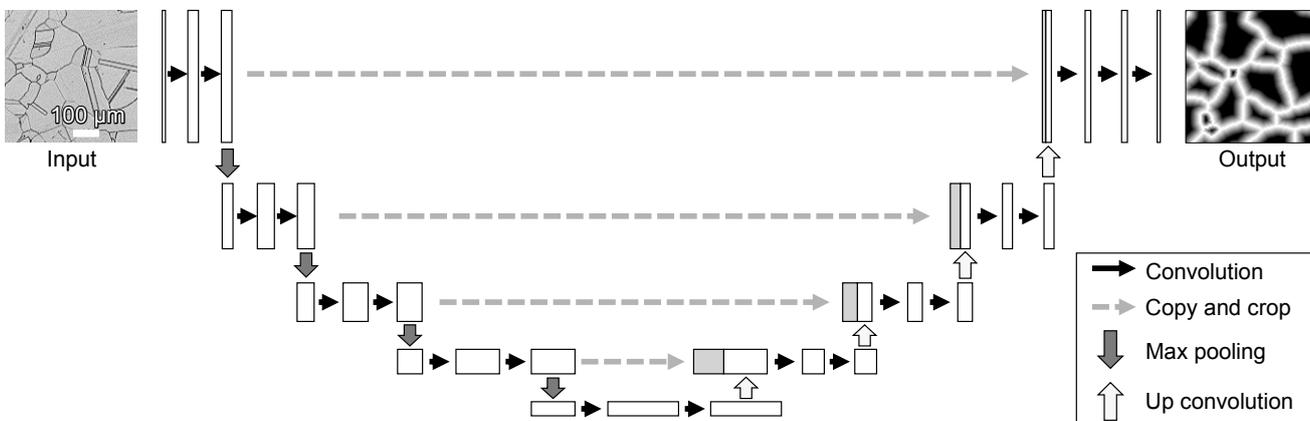


Fig. 2. Schematic of U-Net.

業者によって、手作業で粒界のマーキングを実施する必要があるが、これには多大な時間を要する。そこで本研究では、粒界のマーキングの時間を削減と精度を担保する、機械学習と画像処理を用いた粒界検出自動化システムを開発した。

2. 解析方法

2. 1 機械学習・前処理の課題

近年、機械学習の発展により画像解析の技術が進歩しており、マイクロ組織画像解析にも用いられている⁵⁾。当社においても、Ni基超合金におけるSEM（走査型電子顕微鏡）写真の相識別について、機械学習を活用した組織解析を行っている⁶⁾。機械学習とは、明示的にプログラムをする画像処理と違い、データを解析してパターンを抽出することで予測が可能となる⁷⁾。中でも、機械学習の技術の一つであるセマンティックセグメンテーションは、画像内のピクセル一つ一つに対して予測が可能であり、Fig. 1のような画像が再現可能である。

Fig. 2 にセマンティックセグメンテーションの代表的なモデルの一つである、U-Net⁸⁾ 構造の概要を示す。U-Net では畳み込み層とプーリング層からなる、エンコーダ部分で画像の特徴抽出を行い、デコーダ部分で抽出した特徴をアップサンプリングし、入力した画像サイズまで戻す。その際、エンコーダとデコーダをスキップ接続することで、詳細な位置情報を失うことなくセグメンテーションマップが作成可能となる。

オーステナイト結晶の粒界検出に機械学習を適用する場合、腐食や画像の品質にもよるが、粒界が途切れる課題が残されていた⁶⁾。そこで本研究では、入力する教師データセットの内、粒界をマーキングした正解画像に対

する前処理の手法に注目した。前処理として、Fig. 3のように粒界に対して粒の内側方向へ膨張処理を行い、その後、膨張終端部を黒色（画素値0）、膨張開始部を白色（画素値255）となるように画素値に傾斜を付けた。膨張させた粒界の画素値に傾斜を付けた理由は、粒界（画素値255）の膨張処理のみでは、小さい粒の場合、膨張によって粒内すべてが粒界で埋まり、後に結晶粒径として認識できなくなることを避けるためである。このため、粒界の膨張幅が粒の大きさを超えてしまう場合には、膨張によって粒界で粒内が満たされた時点で、膨張終端と膨張開始部の間の画素値に傾斜を付けることで解決した。機械学習によって推論される画像としては、前処理後のような粒界が膨張した画像が出力される。その画像を元のシャープな粒界画像にする後処理として、二値化と細線化を行った。本研究では、前述した正解画像の前処理工程において、特に膨張幅の条件が、オーステナイト結晶粒径の解析精度におよぼす影響を調査し、最も解析精度が高い最適前処理条件を明らかにすることとした。

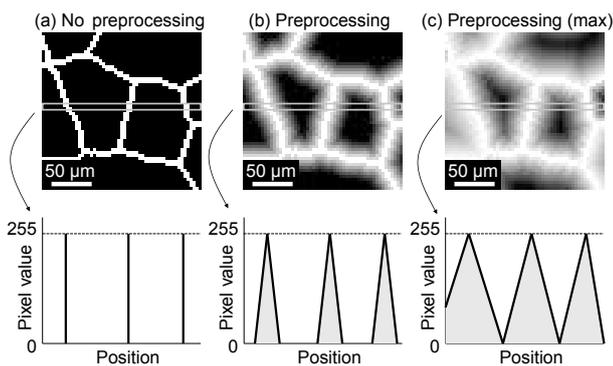


Fig. 3. Schematic of preprocessing.

2. 2 機械学習・前処理の条件

元の光学顕微鏡写真から画像の前処理、機械学習、後処理工程までの処理プロセスの流れを Fig. 4 に示す。具体的には、光学顕微鏡写真取得後、手作業で光学顕微鏡写真と対応させた粒界のマーキング画像を作成の後、前処理を行い、その前処理画像を正解画像とした。また、光学顕微鏡写真を元画像とし、元画像と正解画像のペアの教師データセットを作成した。その後、教師データセットを用いて学習を行い、学習済みモデルを作成した。作成した学習済みモデルと精度検証用の光学顕微鏡写真を用いて推論画像を作成し、推論画像に後処理を行って、粒界画像を作成し、粒界に囲まれた領域を一つの結晶粒として粒径の測定を行った。後処理は二値化と

細線化に加え、精度には影響しないが、粒界の途切れを明確にするため、閉じていない線の除去処理も行った。教師データセットのための元写真には、オーステナイト組織を持つ超合金の代表サンプルとして、Alloy925の再結晶挙動調査用の光学顕微鏡写真を使用した。

Table 1 に解析条件を示す。システムはpythonを用いて作成し、主にpytorch, opencv, segmentation_models_pytorch, optuna, numpyのライブラリを使用した。学習モデル、各種ハイパーパラメータ（バッチサイズ、エポック数、学習率、早期終了についてはベイズ最適化にて最適化した。教師データセットは入力のために256 × 256 pixelの画像に分割し、トレーニングデータと検証用データに振り分けた。また、この時リーケージ対策として、1枚の写真から分割した画像は、トレーニングデータまたは検証用データにまとめて振り分けた。損失関数について、セマンティックセグメンテーションにおいては、IoU (Intersection over Union) や Dice 係数を用いるのが一般的ではあるが、今回、前処理を行うことで粒界を表現する画素値が一定値ではなく、連続的な値となっているため、回帰的なセマンティックセグメンテーションとなっている。そのため損失関数には平均二乗誤差 (MSE) を使用し、学習モデルにおいてはソフトマックス層を除去している。モデルの学習と、膨張幅を除く各種ハイパーパラメータの最適化は835200秒行い、その中で最も損失が小さくなったものを、学習済みモデルとして採用した。試験では、今回着目したパラメータである粒界の膨張幅を変化させ、それぞれ学習済みモデルを作成した。膨張幅が0 pixelの時は前処理なしと同じである。また、膨張幅が最大となるのは、教師データセットの正解画像内の最大粒の内部が、粒界の膨張によって満たされる幅であり、今回は109 pixelが最大の膨張幅となった。粒径測定後の最終的な精度評価として、粒界の一致率による評価が望ましいが、粒界が細く、手描きによる粒界は軽微な線の振れが発生している可能性があり、線の振れによる不一致と推論間違いによる不一致との判別が困難であるため、手描きの正解画像の粒数・粒径と、推論後に後処理をした粒界画像の粒数・粒径との誤差によって評価した。また粒径においては、画像内のすべての粒の粒径を測定できるため、中央値、平均値、面積による加重平均値を算出し、それぞれ比較した。目標値としては各指標において絶対誤差が5%以内とした。精度検証時には画像は分割せず、元の画像サイズで検証した。学習時に検証用として使用した画像を、精度検証用の画像として使用した。

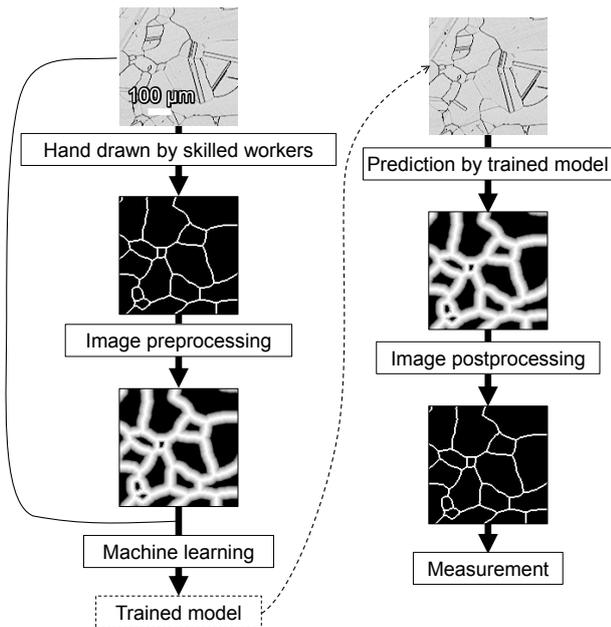


Fig. 4. Experimental process chart.

Table 1. Calculation conditions.

Model	U-Net, UNet++, MANet, LinkNet, FPN, PSPNet, PAN, DeepLab v3, DeepLab v3+
Amount of training data	342 data (256 × 256 pixels)
Amount of validation data	14 data (256 × 256 pixels)
Optimizer	Adam
Loss	MSE
Batch size	2~64
Epoch	100~3200
Learning rate	$1.0 \times 10^{-7} \sim 1.0$
Early stopping	4~128
Data augmentation	Horizontal flip Affine transformation Random brightness Random contrast
Learning and optimization time (s)	835200
Expansion width (pixels)	0 (no preprocessing), 3, 6, 10, 15, 26, 51, 109 (max)

Table 2. Optimization results and loss.

Expansion width (pixels)	0	3	6	10	15	26	51	109
Model	MANet	MANet	U-Net	U-Net	MANet	U-Net	UNet++	MANet
Batch size	50	13	45	13	54	13	13	42
Epoch	3025 (240)	1085 (92)	2796 (308)	1931 (174)	1235 (373)	2855 (1022)	2060 (394)	1733 (1165)
Learning rate	3.9×10^{-4}	3.9×10^{-4}	1.9×10^{-4}	2.7×10^{-3}	2.7×10^{-4}	2.8×10^{-5}	8.2×10^{-5}	7.4×10^{-5}
Early stopping	83	91	67	81	86	107	114	30
Loss	2309	1595	1830	1581	1713	1320	1156	1787

3. 前処理方法の最適化

Table 2 に最適化したモデルと各種ハイパーパラメータ、および学習終了時の損失を示す。エポック数については早期終了によって設定したエポック数よりも早期に学習が終了したため括弧内に実際のエポック数を示している。Fig. 5 に膨張幅を変化させた時の推論画像と後処理画像を示す。Fig. 6 に測定した各膨張幅での粒数の絶対誤差を示す。各膨張幅の粒数の誤差では、膨張幅が 10 pixel の時に最も誤差が小さくなった。Fig. 7 のように膨張幅が 0 pixel の時は粒界に途切れが発生し、それにより計測される結晶粒の数が少なくなることから誤差が増大する。膨張幅を増加させる前処理を行うことで、粒界の途切れが解消され誤差が減少するものの、ある膨張幅より大きくしすぎると、Fig. 8 のように粒のくびれ部分が後処理の二値化の際に、適切に複数の粒界として抽出できずに一体化し、別の粒が分割されることで、計測される結晶粒の数が増え、誤差が増大する。Fig. 9 に面積による加重平均値の絶対誤差を示す。各膨張幅の粒径の面積による加重平均値の誤差では、膨張幅が 10 pixel の時に最も誤差が低くなっている。Fig. 7 のように膨張幅が 0 pixel の時は粒界の途切れが発生するため、隣接する粒が一体化し粒径が大きくなってしまい、結果として粒径の誤差が大きくなる。前処理を行うことで粒界の途切れが解消されるため、いったんは誤差が減少するものの、膨張幅を大きくしすぎると、Fig. 8 のように粒のくびれ部分で粒が分割されることに加え、Fig. 10 のように粒径差が大きな粒が隣接した時には、画素値の勾配の差が大きくなるため、二値化と細線化の後処理によって、大きな粒は内側へ、小さな粒は外側へと、粒界が移動することで、粒径の誤差が大きくなる。Table 3 に各膨張幅における粒数、粒径の中央値、平均値と面積による加重平均値の評価をまとめて示す。結果として、膨張幅が 10 pixel の時、すべての誤差が 5% 以下となり、前処理方法として最適な条件であることを確認した。

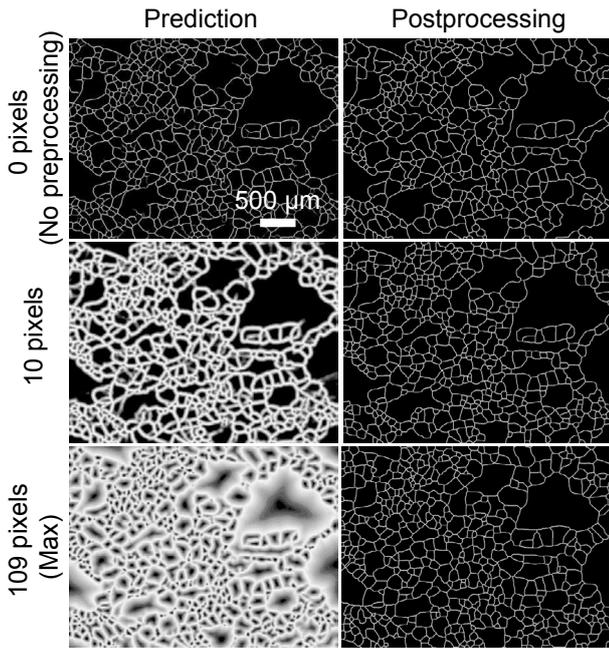


Fig. 5. Prediction image and postprocessing image.

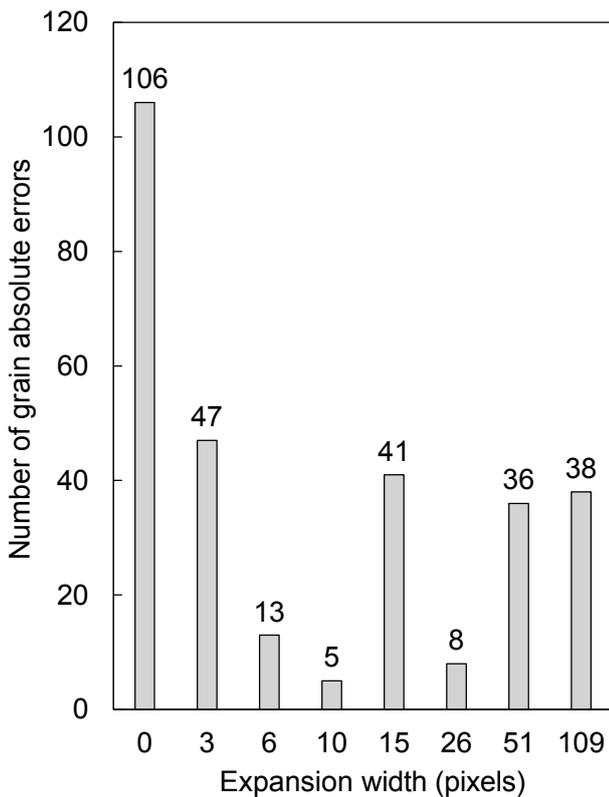


Fig. 6. Comparison of absolute errors in number of grains among expansion widths.

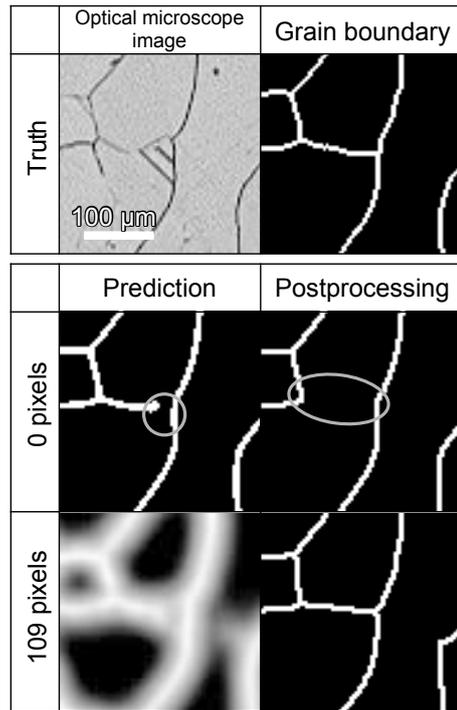


Fig. 7. Suppression of grain boundary breakdown by image preprocessing.

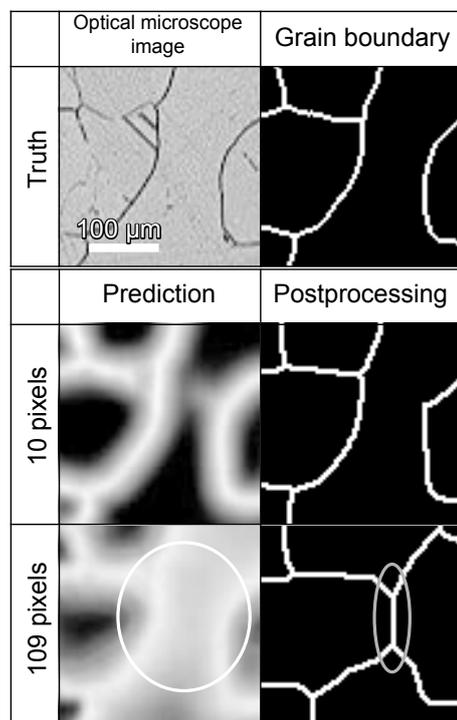


Fig. 8. Integration of the neck of the grain due to large expansion width.

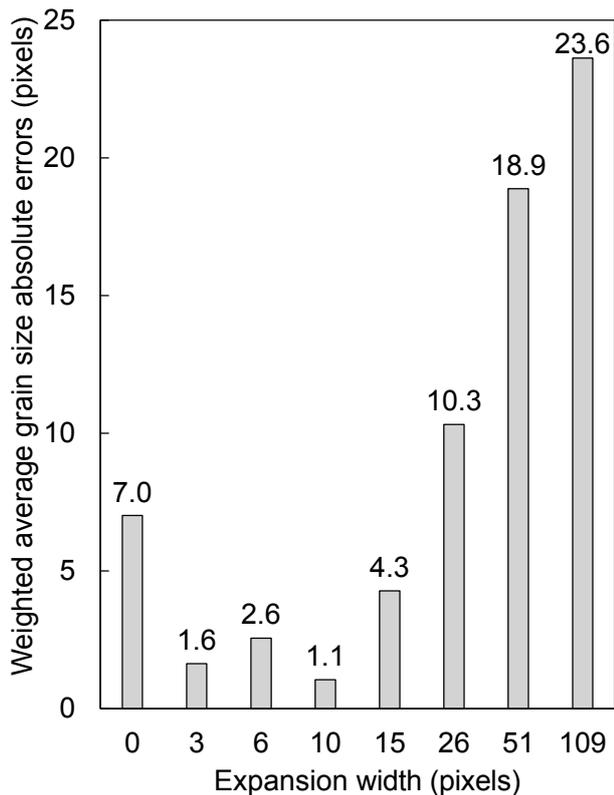


Fig. 9. Comparison of absolute errors in weighted average grain size among expansion widths.

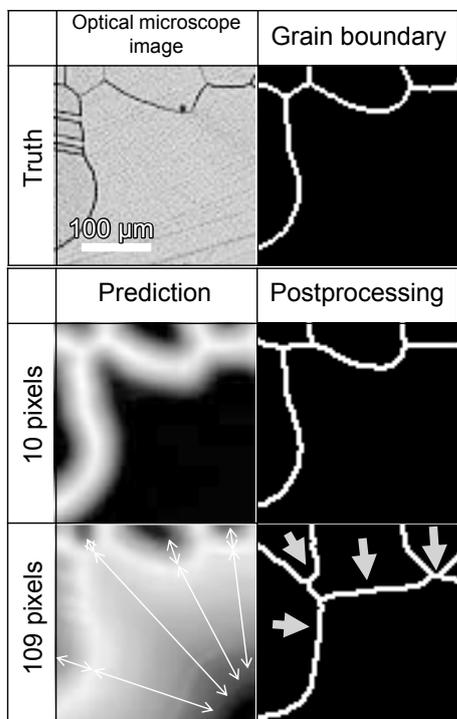


Fig. 10. Large expansion width causes grain boundary shift.

Table 3. Comparison of results among expansion widths.

Expansion width (pixels)	0	3	6	10	15	26	51	109
Number of grain	×	×	○	○	△	○	△	△
Median grain size	×	○	△	○	○	△	△	△
Average grain size	×	△	○	○	○	○	○	○
Weighted average grain size	△	○	○	○	○	×	×	×
Result	×	×	△	○	△	×	×	×

$\leq \pm 5\%$: ○, $\leq \pm 10\%$: △, $> \pm 10\%$: ×

4. 結 言

本研究では機械学習を用いた、オーステナイト結晶粒径計測精度に寄与する前処理手法を開発した。粒の内側へ粒界を膨張させ、膨張開始部と膨張終端間の画素値に傾斜を付けることで、機械学習後の推論での粒界の途切れが抑制され、高精度な粒径計測手法を実現した。本手法を用いて Alloy925 の光学顕微鏡写真の解析試験を行った結果、膨張幅 10 pixel の条件において、粒数と粒径の絶対誤差が 5% 以下となり、最も予測精度が高くなることが確認された。

本手法により、光学顕微鏡で得たミクロ組織画像から結晶粒径を正確に定量化する作業が容易となった。この技術の応用により、結晶粒径の平均値だけでなく、結晶粒径の分布まで考慮した高度な組織予測技術の発展が期待される。

(文 献)

- 1) 大木優太郎: 特殊鋼, 71(2022), 5, 34.
- 2) T. Okajima, S. Sakurai and M. Fujiwara: Int. Conf. IFM2014, (2014), 198.
- 3) 大竹拓至, 杉野敦, 岡島琢磨: 電気製鋼, 93(2022), 79.
- 4) 日本規格協会: JIS G0551 (2020).
- 5) 足立吉隆, 田口茂樹, 弘川奨悟: 鉄と鋼, 102(2016), 722.
- 6) 原田絵美, 森大輔: 電気製鋼, 93(2022), 85.
- 7) 鈴木大慈: 応用数理, 28(2018), 1, 32.
- 8) O. Ronneberger, P. Fischer and T. Brox: MICCAI Proc., 18, PartIII (2015), 234.



児嶋 彬



本田百花



岡島琢磨