

技術論文

機械学習による鉄鋼材料ミクロ組織の識別技術

Machine Learning-based Microstructural Analysis for Steel Materials

筒井和政*

Kazumasa TSUTSUI

森戸茂一

Shigekazu MORITO

林宏太郎

Koutarou HAYASHI

寺崎秀紀

Hidenori TERASAKI

森口晃治

Koji MORIGUCHI

抄録

鉄鋼材料は合金組成や熱処理に応じて多様な機械的特性を発現する。その起源は内部のミクログルーブの金属組織に由来し、その識別が極めて重要である。鉄鋼ミクログルーブの把握は、電子顕微鏡(SEM)や電子後方散乱(EBSD)などが用いられるが、それぞれ形態論的、結晶学的な知識を必要とするため、時として識別結果に個人差を生ずる。我々はこのような属性の排除を念頭に、鉄鋼ミクログルーブ識別の自動化および定量化を目的として機械学習技術の適用を試みた。本報では、低炭素鋼から採取したEBSDやSEMデータに対して種々の機械学習アルゴリズムを適用した結果を報告する。

Abstract

Steel materials exhibit a broad range of mechanical properties, depending on alloy composition and heat treatment. It is therefore important to grasp such information given that these variations originate from the metallic structure in the micron-scale. The microstructure of steel can be determined by scanning electron microscopy (SEM) and electron backscattering diffraction (EBSD). Since analyses by SEM and EBSD require deep expertise in morphology and crystallography, respectively, this can sometimes lead to individual differences in identification results. We sought to leverage machine learning algorithms to automate and standardize the identification of microstructures in steel, with the objective of eliminating inter-individual variations. In this paper, we present the findings from the application of various machine learning algorithms to EBSD and SEM data collected from low-carbon steel.

1. 緒言

鉄鋼材料は自動車、建築、造船など、幅広い用途に用いられる金属材料である。このような幅広い用途を満足するためには、添加元素の調製や種々の熱処理を施し、鉄鋼材料内部のミクログルーブの金属組織を適切な形態となるよう制御する必要がある。所望の機械特性を得る上で、特定のミクログルーブが発現するメカニズムや物理的および化学的な様態を把握することは極めて重要であり、Scanning Electron Microscopy(SEM)やElectron Back Scattering Diffraction(EBSD)といった分析技術は必要不可欠な手段となっている^{1,2)}。

例えば低炭素鋼を基礎とした高強度自動車用鋼板では、組成や熱処理条件に応じてマルテンサイト、上部ベイナイト、下部ベイナイトといった複数のミクログルーブが混在し、

複雑な様相を呈する³⁾。このような材料に対するSEM観察では、これらのミクログルーブの識別や範囲の特定が困難であり、専門家でも評価が分かれる場合がある。また、EBSDによる結晶方位解析を併用すればミクログルーブ識別の精度向上が期待できるものの、高度な結晶学知識と分析時間を要する⁴⁾。このように、分析手法の属性に起因するばらつきを低減し、迅速かつ信頼性の高いミクログルーブ識別を行うための、客観的かつ定量的な組織評価方法の確立が望まれている⁵⁾。

このような背景の下、本研究グループは機械学習技術を活用して鉄鋼材料のミクログルーブ識別の自動化と高速化の実現、および、定量的で再現性の高い識別技術を確立することを目的に研究を行った⁶⁻¹⁴⁾。具体的には、EBSDによる結晶方位解析の結果から特徴量を算出し、機械学習アルゴリズムの訓練に用いる、または、従来は目視識別に依存して

* 先端技術研究所 数理科学研究部 主幹研究員 博士(理学) 千葉県富津市新富20-1 〒293-8511

いた SEM 解析に特微量抽出や深層学習を適用することで、ミクロ組織の自動識別技術を開発することを目指した。

本研究の独自性として、(1) 形態論的特微量や結晶学的指標を古典的な機械学習モデルに組み込む手法と、(2) 深層学習モデルを用いて画像から直接特微量学習する手法の両面からアプローチし、高精度かつ汎用的な識別を志向している点が挙げられる。前者は識別根拠となる特微量を予め決めるが、後者は特微量が学習によって得られる。これらの技術の活用により、鉄鋼組織解析の効率化や定量化だけでなく、新規の材料設計指針の提案や品質評価手法の高度化といった産業界への波及効果も期待できる。本報では、これらの研究を概観するとともに、得られた結果とその意義について述べる。

本報の構成は以下のとおりである。2章にて、本研究にて用いたデータセットを導入する。3章にて上述の(1)および(2)の検討に関する概要を示す。4章において本研究により得られた結果を示し、それらについて議論する。5章にて本論文を総括する。

2. 試料およびデータセットの構築

本研究では、試料として Fe-0.1C-0.01Si-2.0Mn-0.008P-0.001S (mass%) の低炭素鋼^{6,14)}を選択した。異なるミクロ組織を得るために、図1に示す計8種類の熱処理を施した。各熱処理条件により得られた試料には、マルテンサイト (MS), 上部ベイナイト (UB, BII), および下部ベイナイト (LB, BIII) といった多様なミクロ組織が含まれるよう配慮した。これらのミクロ組織の同定は、後述する Bramwitt と Speer³⁾による形態論的識別基準を用いた SEM 観察と、dilation method によるマルテンサイト分率の評価により行った(表1)。特に、本研究では、これら8種の試料を機械学習の識別対象カテゴリとした。以下の小節にて各試料の SEM および EBSD 測定を行いデータセットの取得方法を示す。

2.1 EBSD データセットの構築

8種の各試料に対して、EBSD による結晶方位の測定を視野の重複なく 12 回ずつ行った。いずれの測定も以下の条件にて統一し実施した。測定面積はいずれも $12800\mu\text{m}^2$ にて固定した。また EBSD の加速電圧は 15kV、測定のステップ幅は $0.2\mu\text{m}$ とした^{6,9)}。方位測定により得られた Inverse Pole Figure (IPF) マップの例を図2に示した。

本研究では上記の結晶方位のデータから、機械学習モデルに用いる特微量として、Kernel Averaged Misorientation (KAM) 値とバリエント境界密度を算出した。KAM 値の算出は、選択されたカーネル内の誤差角度が 2° ⁴⁾ を超えない範囲にて、第3番近傍までの誤差角度を平均化することで算出した。以下に、バリエント境界密度の概要を示す。

低炭素鋼のオーステナイト (γ) 粒からフェライト (α') 粒へ

の変態において、異なる結晶方位をもった複数の α' 粒が形成される。これらをバリエントと呼ぶが、単一の γ 粒から生成する α' 粒のバリエントの方位関係は、以下の Kurdjumov-Sachs (KS) 関係^{15,16)} に従うことが知られている。

$$\{111\}_{\gamma} \parallel \{110\}_{\alpha'}, \quad \langle 110 \rangle_{\gamma} \parallel \langle 111 \rangle_{\alpha'}$$

KS 関係により、1つの γ 粒内には 24通りの異なる変態方位、すなわち 24種の KS バリエントが形成され、隣接するバリ

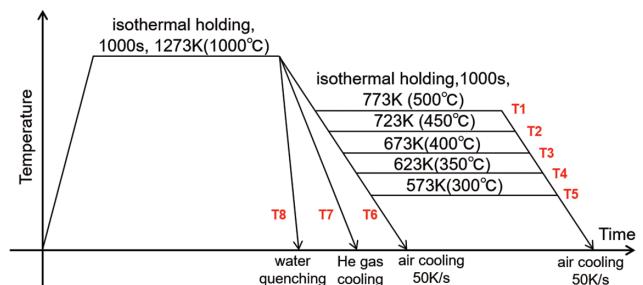


図1 供試材の熱処理パターンの概要

Tsutsui et al. (2025)¹⁴⁾ より、許諾の元転載

Schematic of thermal processing patterns of specimens
Source: reproduced from Tsutsui et al. (2025)¹⁴⁾, with permission

表1 供試材のマルテンサイト分率とミクロ組織の種別
Information for the specimens of martensite fraction and types of microstructures

| Label | Martensite fraction (%) | Microstructural type |
|-------|-------------------------|----------------------|
| T1 | 0 | UB |
| T2 | 2.1 | UB and LB (UB rich) |
| T3 | 63.6 | UB and LB (LB rich) |
| T4 | 63.9 | UB and LB (LB rich) |
| T5 | 62.2 | UB and LB (LB rich) |
| T6 | 70 | LB |
| T7 | 97.8 | LB and MS |
| T8 | 100 | MS |

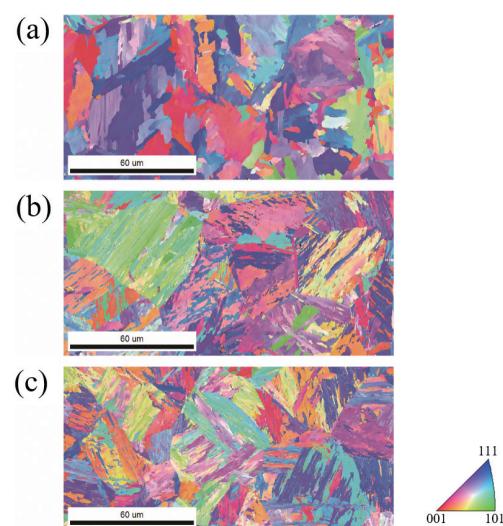


図2 IPF マップの例

(a) T1 (UB), (b) T6 (LB), (c) T8 (MS)
Examples of IPF maps of (a) T1 (UB), (b) T6 (LB), and (c) T8 (MS)

表2 同一 CPP 関係にある KS バリアント

本関係は $(111)_\gamma // (011)_{\alpha'}$ を基準に選択している。バリエントに付与した番号は、Morito et al.⁴⁾による定義を使用
KS variant in same CPP relationship
The relationship is selected by $(111)_\gamma // (011)_{\alpha'}$. Refer to the definition of the variant numbers by Morito et al.⁴⁾

| Variant no. | Close-packed orientation relationship | Misorientation angle and axis with V1 (theoretical) | Misorientation angle and axis with V1 (experimental) |
|-------------|---|---|---|
| V1 | $[\bar{1} 0 1]_\gamma // [\bar{1} \bar{1} 1]_{\alpha'}$ | — | — |
| V2 | $[\bar{1} 0 1]_\gamma // [\bar{1} 1 \bar{1}]_{\alpha'}$ | $60.0^\circ / [1 1 \bar{1}]_{\alpha'} = 70.5^\circ / [0 \bar{1} \bar{1}]_{\alpha'}$ | $68^\circ / \langle 0 1 1 \rangle_{\alpha'}$ |
| V3 | $[0 1 \bar{1}]_\gamma // [\bar{1} \bar{1} 1]_{\alpha'}$ | $60.0^\circ / [0 1 1]_{\alpha'}$ | $60^\circ / \langle 0 1 1 \rangle_{\alpha'}$ |
| V4 | $[0 1 \bar{1}]_\gamma // [\bar{1} 1 \bar{1}]_{\alpha'}$ | $10.5^\circ / [0 \bar{1} \bar{1}]_{\alpha'}$ | $7^\circ / \langle 0 1 1 \rangle_{\alpha'}$ |
| V5 | $[1 \bar{1} 0]_\gamma // [\bar{1} \bar{1} 1]_{\alpha'}$ | $60.0^\circ / [0 \bar{1} \bar{1}]_{\alpha'}$ | $60^\circ / \langle 0 1 1 \rangle_{\alpha'}$ |
| V6 | $[1 \bar{1} 0]_\gamma // [\bar{1} 1 \bar{1}]_{\alpha'}$ | $49.5^\circ / [0 1 1]_{\alpha'}$ | $52^\circ / \langle 0 1 1 \rangle_{\alpha'}$ |

アントはバリエント対と呼ばれる。バリエント対の隣接のしやすさは熱処理や組成によって変化することが知られている^{17,18)}。特に、24通りのバリエントの1つをV1とみなした際、同一の最密面方位(CCP)関係にある方位は5つ存在する。以降、これらのバリエント対を、Moritoら⁴⁾の表記に倣い、V1-V2, V1-V3/V5, V1-V4, V1-V6と呼ぶことにする。該当する方位関係を表2に示した。これらの境界長さを観測視野の面積で除した量がバリエント境界密度である¹⁸⁾。

以上の手続きにより計96個、V1-V2, V1-V3/V5, V1-V4, およびV1-V6のバリエント密度と、KAM値からなる5次元のデータセットを得た。本データセットは総数が少ないため、後述するMLモデルの訓練では、5回の交差検証を実施して精度を評価した⁷⁾。

2.2 SEM 画像データセットの作製

以下に、SEM 画像の撮影条件を示す。作製した8種類の試料はそれぞれ9μmと3μmのダイアモンドペーストで研磨後に、3%ナイタルにて腐食を施した。SEM 線源には、タンゲステン(W)と電解放出型(FE)の2種類を用いて、1500倍の画像を取得した¹²⁻¹⁴⁾。画像は線源、試料ごとに、それぞれ30枚ずつ取得した(計 $2 \times 30 \times 8 = 480$ 枚)。なお、その際の加速電圧は両線源とも共通の15kVとした。空間解像度はWとFE線源それぞれで3.0nmおよび30nmである。得られたSEM画像の寸法は、WとFE線源それぞれで 1280×1024 px, 1280×960 pxであった。各試料のFE-SEMおよびW-SEM画像を、図3および4にそれぞれ示しておく。視覚的には、FE-SEM像は材料表面の凹凸が滑らかに撮像されているのに対し、W-SEM像はより平坦に撮像されていることが見て取れる。

1章で述べた通り、本研究では、(1)特微量抽出と古典的な機械学習モデルによる識別、(2)深層学習モデルによる画像の直接識別、の2つのアプローチをとった。以下に、SEM 画像のデータセットに採用した前処理と、特微量抽出の手続きを示す。

2.2.1 SEM データセットへの前処理

得られたSEM画像に対して施した前処理を以下に示す。初めに、画像間のコントラスト調整を目的に contrast-limited adaptive histogram equalization (CLAHE) 処理を施した。その後、モデル訓練とテスト用に、80%:20%にデータセットを分割した。さらに、SEM画像を用いた(1)および(2)のアプローチでは、多数決(voting)による精度向上を志向した。そこで、これらの画像を小画像に分割して用いることとした。

(1)のアプローチでは、元画像の中央を起点に 880×880 pxに切り出した後、16等分して用いた。この際の小画像のサイズは 220×220 pxとなる。この処理は、訓練データ、テストデータとともに共通である¹¹⁾。

また、(2)深層学習モデルを用いたアプローチでは、訓練データに対してはデータ増幅を施した。具体的には、ランダムな切り出しと画像の回転により、元画像1枚当たり400枚の小画像を 224×224 pxにて切り出した。テストデータに対しては、画像の中央を起点に 224×224 pxにて画像を計20枚重複なく切り出した。この小画像の寸法は、我々の用いた深層学習モデルの入力サイズに合わせている¹²⁻¹⁴⁾。

2.2.2 形態論的特微量の抽出

BramwittとSpeerの提案した、上部ペイナイト、下部ペイナイト、およびマルテンサイトの形態論的な識別基準³⁾は以下のとおりである。上部ペイナイトおよび下部ペイナイトは、ともにラス状の α' 組織を有し、炭化物が析出していることが特徴である。上部ペイナイトはフェライト粒界間、下部ペイナイトは粒内に微細に分布する点に差異がある。マルテンサイトは炭化物の析出を伴わないことが特徴である。

SEM 画像に対する(1)のアプローチでは、上記の形態的な差異を捉えるために適切な特微量を選定する必要がある。特に、図2および3からもわかるように、マルテンサイトやペイナイトの形態的な特徴、すなわちフェライト組織の平坦さやラス粒界および炭化物といった情報は画像内の輝度の大小による平坦さや乱雑さといったテクスチャ

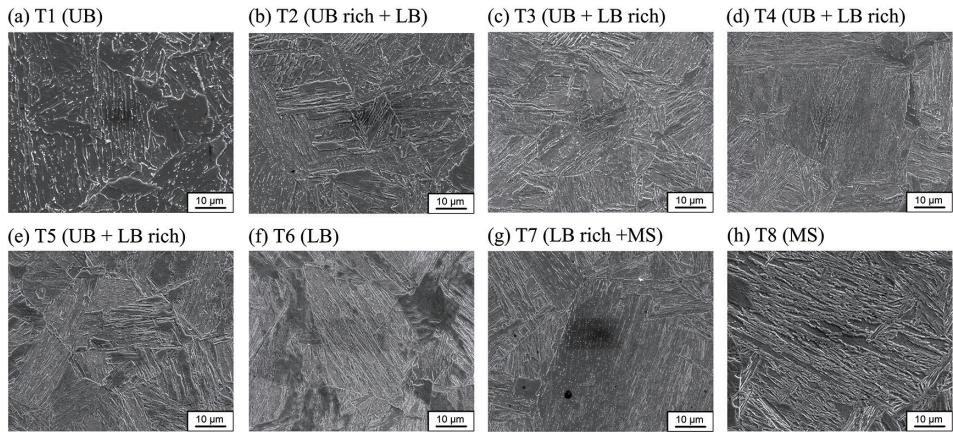


図3 FE-SEM画像の例
Tsutsui et al. (2025)¹⁴⁾より、許諾の元転載
Examples of FE-SEM images
Source: reproduced from Tsutsui et al. (2025)¹⁴⁾, with permission

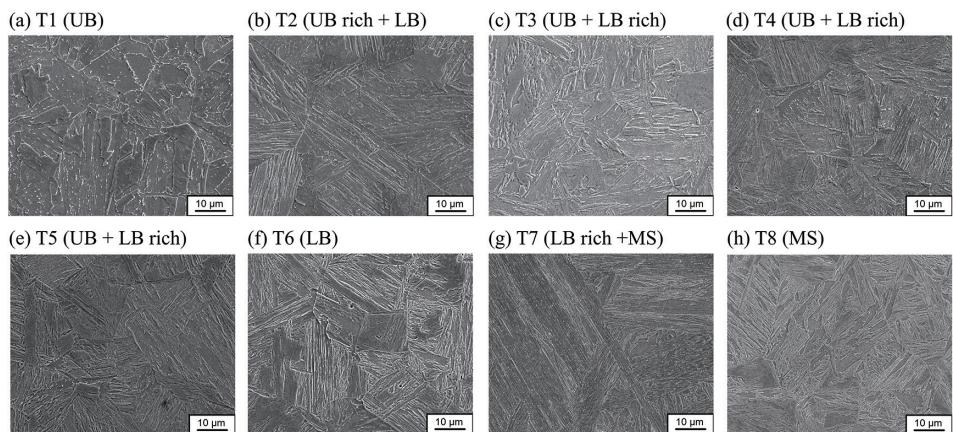


図4 W-SEM画像の例
Tsutsui et al. (2025)¹⁴⁾より、許諾の元転載
Examples of W-SEM images
Source: reproduced from Tsutsui et al. (2025)¹⁴⁾, with permission

(質感)に反映されている。このような輝度分布の様態を評価可能な特微量抽出法として、グレーレベル共起行列(GLCM)法^{19, 20)}が挙げられる。GLCM法の概要は以下のとおりである。

GLCM法では、はじめに、画像内である画素値*i*の画素と、距離*d*、方向θだけ離れた位置にある画素値*j*との組み合わせの出現頻度を表す共起行列 $P(i,j|d,\theta)$ を構成する。 $P(i,j|d,\theta)$ に種々の期待値を取ることで、画像中のテクスチャを数値化できる。代表的な指標として、以下のhomogeneity *H*とentropy *E*が挙げられる。

$$H \equiv \sum_{i,j} \frac{P(i,j|d,\theta)}{1 + |i-j|}, \quad E = -\sum_{i,j} P(i,j|d,\theta) \log P(i,j|d,\theta)$$

これらはそれぞれ画像の平坦さと乱雑さを表現するテクスチャ値である。なお、本研究では、Weibelら^{21, 22)}に倣い、*d*=1としてθを0°から180°の範囲で平均化した共起行列を構築し、*H*および*E*を含む計19個のテクスチャ値を算出した。算出したテクスチャ値の詳細は、拙著^{10, 12)}に譲る。

なお、その他の画像のテクスチャ解析の例として、Locally Binary Pattern (LBP)法^{23, 24)}が挙げられる。LBP法は画像中の各ピクセルと、その周辺ピクセルの輝度差を算出し、その大小を2進数に変換し、10進数に符号化する特微量抽出方法である。さらに、訓練済の深層学習モデルの中間層出力を特微量抽出に用いる方法²⁵⁾などもあるが、本報では形態論的な指標と対応の取りやすいGLCM法を採用することにした。

3. 機械学習および深層学習アルゴリズム

3.1 各アプローチにて使用したモデル

本節では、本研究で用いたアルゴリズムについて導入する。繰り返しとなるが、本研究グループの取り組みは、(1)特微量抽出と古典的な機械学習モデルによる識別、(2)深層学習モデルによる画像の直接識別に大別できる。以降、古典的な機械学習モデルをMLモデル、深層学習モデルをDLモデルと呼ぶことにする。

(1) のアプローチでは、EBSD と SEM のデータセットを独立に用いて、ML モデルを訓練することで識別性能や有効な特徴量について調査した。EBSD データセットに対しては、後述する microstructural diagram (ミクロ組織図) の構築を念頭に、カーネルマシンの一種である support vector machine (SVM)^{26,27)} を主に用いた。SEM 画像のデータセットに対しては、識別に寄与した GLCM 特徴量の推定を念頭に、決定木アルゴリズムを基礎とした random forest(RF)²⁸⁾ や light gradient boosting machine (lightGBM)²⁹⁾ を用いた。特に、FE-SEM と W-SEM のデータセットは独立に訓練に用いて、撮影条件ごとの識別性能や有効な特徴量に差異が生じるかを検討した。

(2) のアプローチでは、残差ブロックを有する DL モデルである residual net 50 (ResNet50)³⁰⁾ を採用した。その際、FE-SEM および W-SEM のデータセットは独立に用いることとし、2 つの ResNet50 を訓練した。なお、本アプローチでは、画像を直接用いるため識別に寄与した画像中の領域を Local Interpretable Model-agnostic Explanations (LIME) 法³¹⁾ を用いて推定することにした。(1) とも関連するが、訓練データとして用いた撮影条件 (FE もしくは W) とは異なる撮影条件の SEM 画像をテストデータに採用した場合、同一の撮影条件を用いる場合と比較して ResNet50 の精度が著しく低下することがわかった。そこで、その是正について、敵対的生成ネットワーク (GAN) の一つである cycle consistent GAN (cycleGAN)³²⁾ を適用することで、撮影条件の変換を検討した。

本研究で用いた ML もしくは DL モデルの内、特に機構が複雑な LIME 法と cycleGAN については、次の小節にてアルゴリズムの詳細を示しておく。なお、他のモデルに関しては、原著論文²⁶⁻³⁰⁾に加えて、例えば Bishop³³⁾ や Goodfellow³⁴⁾ に良い解説が与えられているため本報では割愛する。また、詳細なモデルの訓練条件は、上述した拙著を参照されたい。

3.2 LIME 法

LIME 法は、推定の過程が複雑もしくはブラックボックス的な ML および DL モデルの予測において、予測に寄与した入力データの成分や領域を、局所的な予測モデルを用いて推定する手法である。本手法は、画像を入力とする DL モデルにも適用可能である。以下に、DL モデルへの LIME 法の適用について説明する。

初めに、入力画像を小さな領域 (superpixel)³⁵⁾ に分割する。次に、各 superpixel の有無をランダムに変化させたマスク画像を複数作成する。それらを訓練済の深層学習モデルに入力して予測値を取得することで、マスクされた画像に対しての予測値の対 (近傍データセット) を得る。さらに、近傍データセットの予測値の正誤を予測する局所的な線形モデル $g(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^T \mathbf{x}$ を訓練する。ここで、 \mathbf{x} は superpixel の総数

と等しい次元を持ったベクトルであり、マスクされた領域とそうでない領域にそれぞれ 0 および 1 が付与されている。 \mathbf{w}^T は重みベクトルであり、線形モデルの訓練により決定される。LIME 法では、 \mathbf{w}^T の成分の重みが大きい箇所に対応する superpixel の領域が元の ML もしくは DL モデルにおいて識別に寄与した領域であると判断する。後述の我々の研究においては、SEM 像を分割し、DL モデルが識別に重要視したであろう領域を、重みの大小で判断した。より数学的な背景に関しては、原著論文³¹⁾ に譲る。

3.3 cycleGAN

cycleGAN³²⁾ は Zhu らによって提案されたスタイル変換³⁶⁾ のアルゴリズムの一つである。cycleGAN は、2 つの異なるドメインから得られた画像を相互に変換可能なアルゴリズムである。ここで、ドメインとはある撮影条件および対象から得られたデータの集合を指す。cycleGAN は、類似のアルゴリズムである pix2pix³⁷⁾ とは異なり、ドメイン間で視野や画角が共通の画像を用いる必要がない点が特色である。より具体的には、cycleGAN では、異なる 2 つのドメイン X, Y に含まれる任意のサンプル $x \in X, y \in Y$ に対し、それぞれのドメインの特徴に基づいた $X \leftrightarrow Y$ 間の変換器の対を構築する。

図 5 に cycleGAN の構造の模式図を示す。cycleGAN は、内部に計 4 つの DL モデル ($G_{Y \rightarrow X}, G_{X \rightarrow Y}, D_X, D_Y$) を含む。これらのうち、 $G_{Y \rightarrow X}(G_{X \rightarrow Y})$ は Generator と呼ばれ、ドメイン $Y(X)$ からサンプリングされた画像 $y \in Y(x \in X)$ を入力とし、ドメイン $X(Y)$ の特徴に即した画像へと変換するモデルである。一方、 $D_X(D_Y)$ は Discriminator と呼ばれ、入力された画像が $x(y)$ 、もしくは、スタイル変換後の $G_{Y \rightarrow X}(y)$ ($G_{X \rightarrow Y}(x)$) かを判定する真偽判定用のモデルである。cycleGAN の訓練は、Generator は Discriminator を欺けるような画像を生成するように、Discriminator は正確な真偽判定が可能となるように進行する。

本研究では、FE-SEM および W-SEM のデータセットを

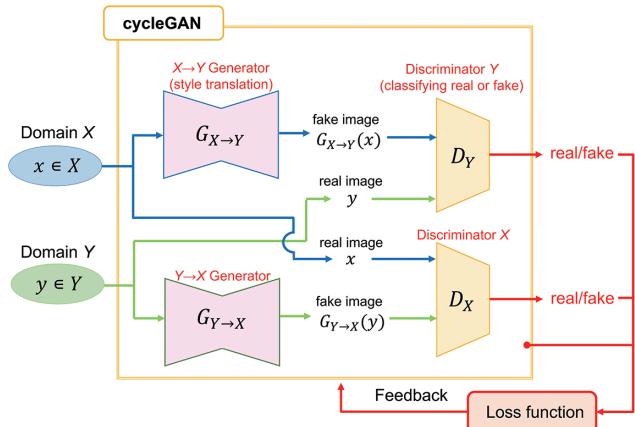


図 5 cycleGAN の概念図
Schematic of cycleGAN

それぞれ異なるドメインとみなし($X \rightarrow \text{FE}$, $Y \rightarrow \text{W}$), cycle GAN を訓練した。具体的なモデルの構造は Nain^{38, 39)}に倣った。以降は、訓練後の Generator を $G_{\text{FE} \rightarrow \text{W}}$ ($G_{\text{FE} \rightarrow \text{W}}$) から生成された“偽”の SEM 画像を, FE2W-SEM (W2FE-SEM) と表記することにする。

4. 結果および議論

本節では、我々の研究結果について示し、それらの結果について議論する。はじめに研究結果の要約を与え、後段の小節にてその詳細について個別に示す。最後に、それらの結果についていくつかの議論を行い、機械学習技術による鉄鋼ミクロ組織識別の今後の展望について述べる。

4.1 研究結果の要約

本小節では、我々の研究グループのこれまでの取り組みについて要約する。図 6 に示すように、本研究では SEM および EBSD のデータセットに対して種々の ML モデルや DL モデルを適用した。

図 6(1) のアプローチでは、バリエント境界密度および KAM といった結晶学的な特徴量と、SEM 画像から得られる形態的な特徴量を用いて、ML モデルを独立に訓練した^{7, 9)}。結晶学的な特徴量を用いた際には、識別に有用な特徴量を選別した。データセットの次元を 5 から 2 に減縮することで、結晶学的な特徴量の張る 2 次元平面上に各ミクロ組織の占める領域をミクロ組織図として可視化できることを見出した。この際に、ミクロ組織図の可視化には機械学習モデルの選定が重要であり、線形カーネルをベースとした SVM が有効であることもわかった。結晶学的特徴量

を学習した機械学習モデルは、87.5%の精度を発揮した。

また、SEM 画像から得られた形態的な特徴量にて決定木をベースとした RF や lightGBM を GLCM 法から得られた形態論的特徴量で訓練したところ、これらのモデルは、最大で 87.5%の精度を発揮した¹¹⁾。さらに、FE もしくは W 線源から得られた SEM 画像のみを訓練したモデルは、別の線源から得られた SEM 画像に対して識別精度が著しく低下することもわかった。

次に、図 6(2) のアプローチでは、ResNet50 を識別器として用いたところ、SEM の撮影条件によらず、識別精度は約 94%となり、(1) のアプローチより優れていることがわかった。さらに、DL モデルの解釈性の確保を目的に LIME 法を適用した。結果として、訓練済の ResNet50 モデルは、マルテンサイトやベイナイト組織の典型的な形態を重視していることを確認した^{12, 13)}。

また、DL モデルは ML モデルと比較して、その際、(1) の形態的特徴量を用いたケースと同様に、訓練データと異なる SEM 線源から得られた SEM 画像に対して ResNet50 の精度は約 40%まで低下すること確認した。そこで、その是正を目的に cycleGAN を適用することで、FE-SEM と W-SEM の撮影条件を変換した。結果として、識別精度が約 90%まで改善することを見出した¹⁴⁾。

なお、先述した通り、SEM 画像データセットの識別においては、(1) および (2) のアプローチとともに、一枚のテスト画像を小画像に分割して識別に供した。本研究では、小画像そのものの識別精度を個別に評価する方法(non-voting)と、一つの元画像に対して対応する小画像の識別結果を多数決することで、元画像に対する識別精度を評価する方法

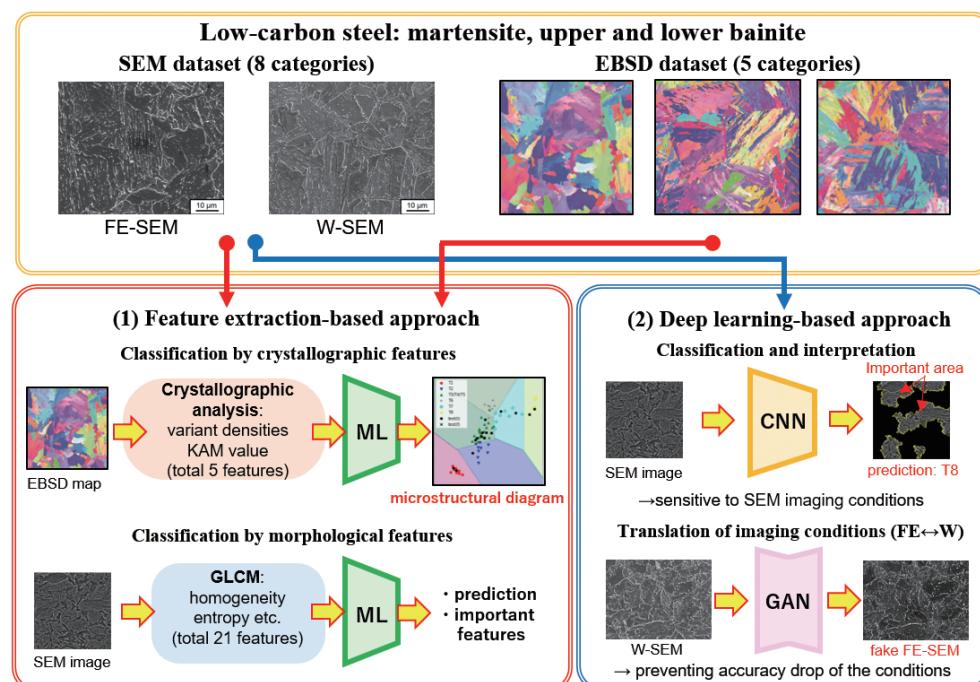


図 6 本研究にて実施した低炭素鋼ミクロ組織識別の要約
Summary of our study on identification for low-carbon steel microstructures

(voting)⁴⁰⁾ の 2 つを採用した。なお、現実の目視識別においても、局所的な形態的特徴を捉えて総合的に組織識別を行うため、voting は人間が行う識別過程を模擬した形式と解釈できる。以上の概念図を図 7 に示した。

4.2 特微量抽出を用いた機械学習の適用

4.2.1 EBSD データによるミクロ組織識別とミクロ組織図

ここでは、バリアント境界密度および KAM 値を用いたミクロ組織識別の結果を示す。モデルの訓練に先立ち、T1-T8 の各試料から 12 個ずつ、計 96 個の 5 次元データに対して外れ値の除去および特微量の選定を行った。その概略を図 8 に示した。具体的には、データに標準化を施したのち、interquartile range (IQR) を 25% から 75% の範囲として外れ値の除去を行った⁴¹⁾。結果として、データの総数は 78 点となった。さらに、本検討では 2 次元での識別を試行し、5 つの特微量から任意の特微量を 2 つ選択し、それらの張る空間内で各データ点が広く分布する組み合わせを探索した。結果として、方位差約 20° の大角粒界である V1-V6 のバリアント境界密度と、KAM 値が選択された⁶⁾。また、EBSD データセットを用いたミクロ組織識別では、マルテンサイト分率が同等の T3, T4、および T5 を十分な精度で識

別することが困難であった。そこで、これらのカテゴリを同一とみなす（計 5 カテゴリ）、ML モデルの訓練に供した。なお ML モデルには SVM を用い、カーネルには線形カーネルを選択した。5 回の交差検証の結果、得られた識別モデルの精度は 87.5% であった。

訓練後の SVM は、V1-V6 と KAM 値の値を入力することで、ミクロ組織のカテゴリを予測する。すなわち、2 次元の平面上に予測ラベルを投影することで、特微量空間中で各種のミクロ組織の占める領域を可視化できる。図 9 にその結果を示した。我々の研究グループは、本図をミクロ組織図^{7,9)}と呼んでいる。このような図を作成することで、新規に取得した試料が訓練データセット内のどのミクロ組織に近いかを参照することが可能となる。例えば、代表的な鋼種に対して事前にミクロ組織図を作成しておくことで、新規の材料を設計する際に、得られたミクロ組織がどのようなミクロ組織を有するかを一目で判断できる。

4.2.2 形態論的特微量を用いた SEM データセットの識別

FE-SEM および W-SEM 画像のデータセットに対し、GLCM 法により抽出した計 19 個の特微量を用いて、RF および lightGBM をそれぞれ訓練した。その際には、FE-SEM

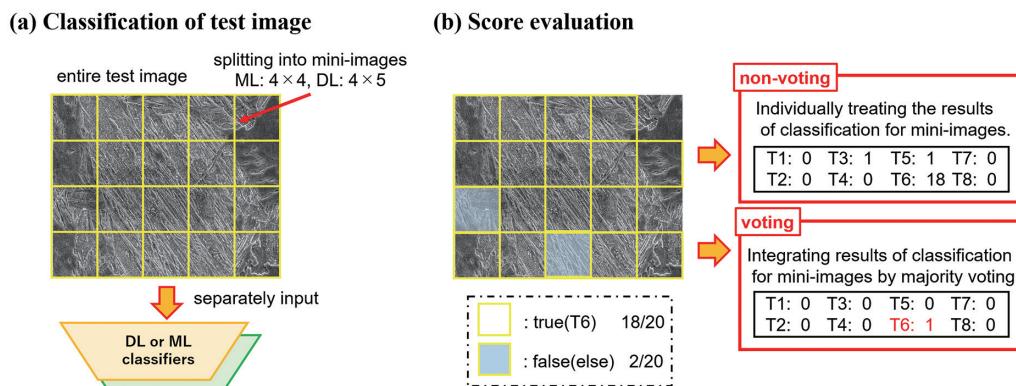


図 7 本研究における SEM データセットを用いた識別方式の概念図
Schematic of the classification strategy for SEM dataset in this study

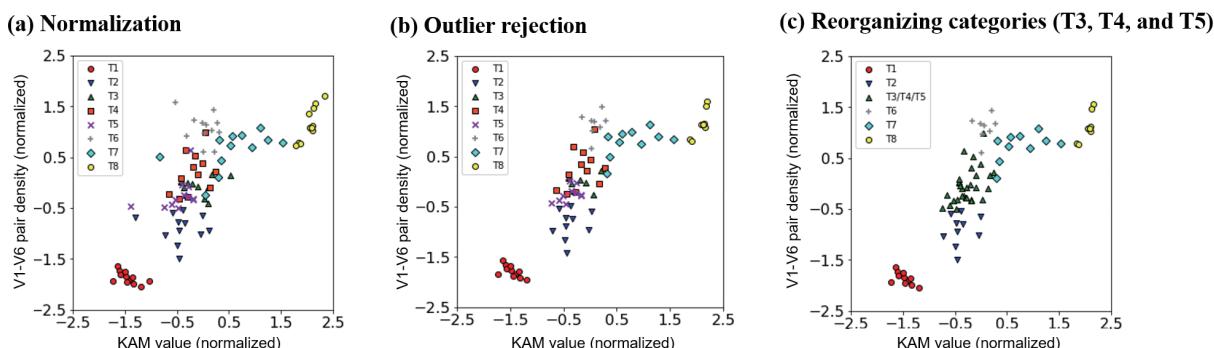


図 8 V1-V6 境界密度と KAM 値の散布図

(a) 正規化後、(b) 外れ値除去後、および (c) T3, T4, および T5 の符号の同一化後

The scatter plot of V1-V6 density and KAM values procced after (a) normalization, (b) outlier rejection, and (c) treating T3, T4, and T5 as the same category.

および W-SEM 画像のデータセットを独立に用いた。テストデータに対するモデルの識別精度を図 10 に示す。はじめに、訓練データとテストデータの撮影条件が同一の場合には、RF および lightGBM は適切に動作していることが確認できる。性能としては、RF よりも lightGBM が高い識別精度を発揮する傾向であった。また、non-voting および voting 形式の精度を比較すると後者が総じて 10% 以上高く、voting 形式の有効性が確認できる。最も高い精度を発揮したのは、W-SEM を学習した lightGBM であり、voting 形式で 87.5% であった¹¹⁾。参考までに、本報で取り上げた SEM データセットに対して LBP 法²⁴⁾を用いて同様の識別を志向したが、精度は 80% 前後であり、GLCM 法を用いた場合よりも劣位であった。

また、訓練データとテストデータの撮影条件が異なる場合には、いずれのモデル、識別の形式を問わず、精度が著しく低下することが見て取れる。また、voting の精度が non-voting よりも低下していることもわかる。このことは、1 枚の元画像に属する小画像の識別結果のほとんどが不正解で

あり、識別結果を統合することでさらなる精度低下を招いたことを示している。

最後に、RF および lightGBM が識別において重視した特徴量を調査したところ、いずれの訓練条件でも homogeneity が重要な特徴量として選択されていることがわかった¹¹⁾。homogeneity は画像の質感として平坦さに応答する量である。本データセットの中で、平坦さに寄与するのは、主に α' 粒や炭化物の大きさである。このことは、2.1.2 項にて述べた形態論的な識別基準において、ラス状の α' 粒や炭化物の分布が重要であることと整合する。このように、GLCM 特徴量の抽出と重要度の評価によって、目視による識別基準に類似した指標が、機械学習による識別においても重要なことがわかった。

4.3 深層学習モデルを用いたミクロ組織識別

4.3.1 ResNet50 によるモデル識別精度

ここでは、SEM 画像のデータセットを訓練した ResNet50 の識別精度について図 11 に示す^{12,13)}。図中の ResNet50-FE および ResNet50-W は、FE-SEM および W-SEM をそれぞれ訓練した ResNet50 を指す。本図から、訓練データとテストデータの撮影条件が一致している場合には、non-voting と voting の双方で、ResNet50 は 94% 以上の識別精度を発揮していることがわかる。また、わずかではあるが、voting の採用による精度向上も見て取れる。

また、訓練データとテストデータの撮影条件が異なる場合には、4.2.2 項での結果と同様に、識別精度は低位となった。特に、これらの ResNet50 の出力層付近から得られた中間出力を t-distributed Stochastic Neighbor (tSNE) 法⁴²⁾を用いてクラスタリングしたところ、訓練およびテストデータの撮影条件が同一の場合には、テストデータの各画像のプロットは識別クラスごとに局在した。一方で訓練とテストデータの撮影条件が異なる場合には、対応するプロットは識別クラスと関係なく混在した¹³⁾。これらの結果は、機械

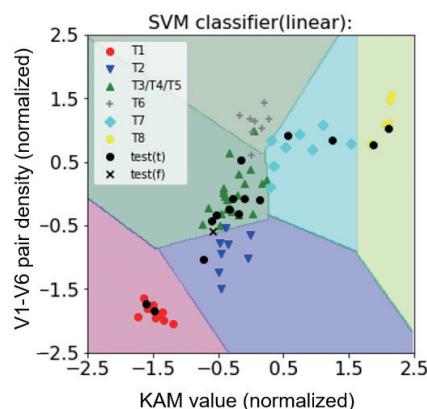
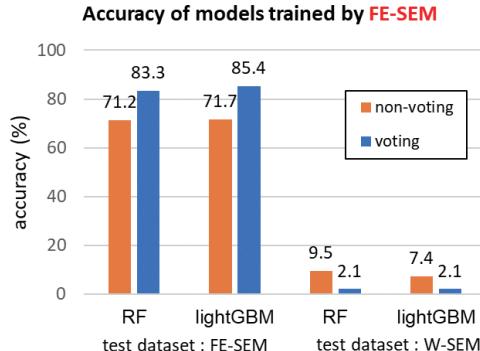


図 9 V1-V6 境界密度と KAM 値の張る空間における低炭素鋼におけるミクロ組織図⁸⁾
Microstructural diagram for low-carbon steel
The space of visualization is spanned by V1-V6 pair density and KAM value⁸⁾.

(a)



(b)

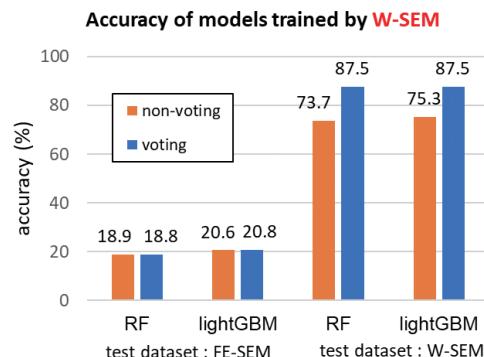


図 10 GLCM 特徴量にて訓練された lightGBM および RF による識別精度

(a) FE-SEM データセットにて訓練されたモデル、(b) W-SEM データセットにて訓練されたモデルの結果
Accuracies of RF and lightGBM trained by GLCM features
(a) accuracies from models trained by the FE-SEM dataset and (b) those from models trained by the W-SEM dataset

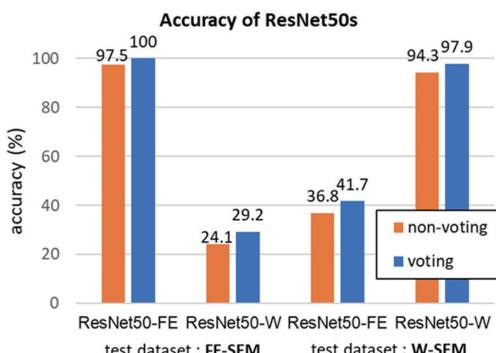


図 11 SEM データセットにて訓練された ResNet50 の識別精度

ResNet50-FE(ResNet50-W)は、FE-SEM(W-SEM)画像にて訓練されたことを表す。

Accuracies of SEM dataset by ResNet50s
The notations of ResNet50-FE (ResNet50-W) mean the model trained by FE-SEM (W-SEM) images.

学習技術を利用した自動識別技術を構築する上でのデータセットの品質保持の重要性を端的に示している。

4.3.2 LIME 法による ResNet50 の識別結果の解釈

前述の通り、ResNet50 は特徴量をベースとした方法よりも高い識別精度を発揮することが確認できたが、識別の過程において、画像中のどの領域を重視したかを直接判断することは困難である。そこで、訓練済の ResNet50-W に対して LIME 法を適用した。UB, LB, および MS の W-SEM 画像への適用結果を図 12 に示す。UB に関しては、粗大な α' 粒および粒界炭化物、LB に関しては、ラス状の粒および粒内炭化物、MS に関しては微細なラス粒およびラスの起点(パケット境界)を識別時に重要視していることが見て取れる。このように、ResNet50 は、従来の目視による識別基準に即した領域を重視していることが確認できた。

4.3.3 cycleGAN による撮影条件の変換

これまでに、訓練データとテストデータの撮影条件の違いが、ML および DL モデルの双方に重大な精度低下をもたらすことを見た。ここでは、cycleGAN を用いた FE-SEM と W-SEM 間の撮影条件の変換によって、ResNet50-FE および ResNet50-W の識別精度がどの程度改善するかを示したのち、変換後の画像の品質について視覚的な評価を行う¹⁴⁾。

図 13 に、cycleGAN の適用前後の ResNet50 の識別精度を示した。本図を見てわかるように、訓練データとテストデータの撮影条件の相違によって 40% 程度まで低下していた ResNet50 モデルの識別精度が、撮影条件が同一の場合と同等の 90% 以上まで回復していることがわかる。この結果から、cycleGAN によるスタイル変換が、撮影条件の変化による精度低下を回避するために有効な手段であることがわかった。

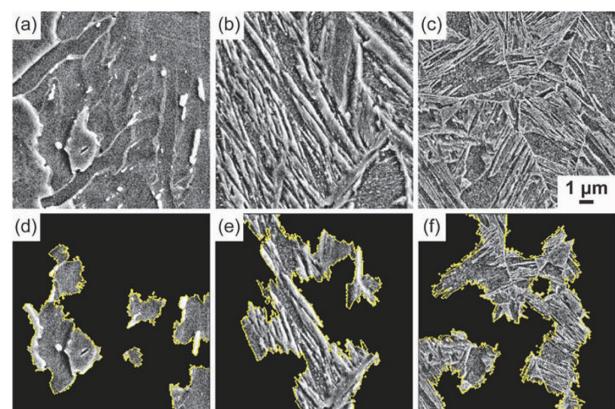


図 12 T1(UB), T6(LB), および T8(MS)の入力 SEM 画像と対応する LIME 法の適用結果

(a), (b), および (c) ((d), (e), および (f)) はそれぞれ入力(出力)画像を表す。Maemura et al. (2025)¹²⁾ より、許諾の元転載

Input SEM images and LIME output images of T1 (UB), T6 (LB), and T8 (MS)

(a), (b), and (c) ((d), (e), and (f)) correspond to the input (output) images of T1, T6, and T8, respectively.

Source: reproduced from Maemura et al. (2020)¹²⁾, with permission

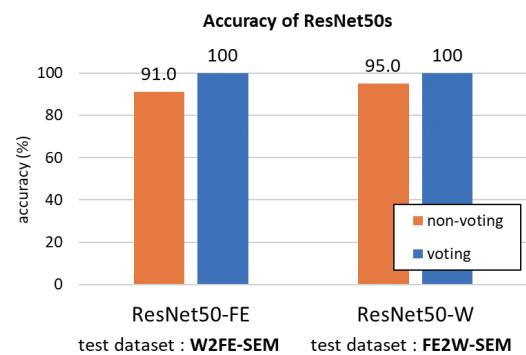


図 13 cycleGAN により変換された画像に対する ResNet50 の精度

Accuracies of ResNet50 models for the translated images by cycleGAN

次に、cycleGAN によるスタイル変換の精度に関して、視覚的な品質を評価するために、変換前後の FE-SEM および W-SEM 画像を図 14 に示す。本図の SEM 画像は、FE-SEM, W-SEM のそれぞれで、視野重複を持つように撮影したものであり、2.2 節にて導入した SEM 画像のデータセットには含まれないことを注意しておく。本図からは、FE-SEM 画像の持つコントラストの明瞭な質感と、W-SEM 画像の持つ平坦な質感を、相互に変換できていることが見て取れる。一方、本画像は、224×224 px にて切り出された小画像を変換後に張り合わせているが、小画像ごとに輝度のばらつきがみられる。このことは、データセット中の各画像の輝度のばらつきを反映したものである。この点に関しては、画像の入力サイズを大きくするか、データセット内の輝度のばらつきを低減するなどで改善できると考えられる。

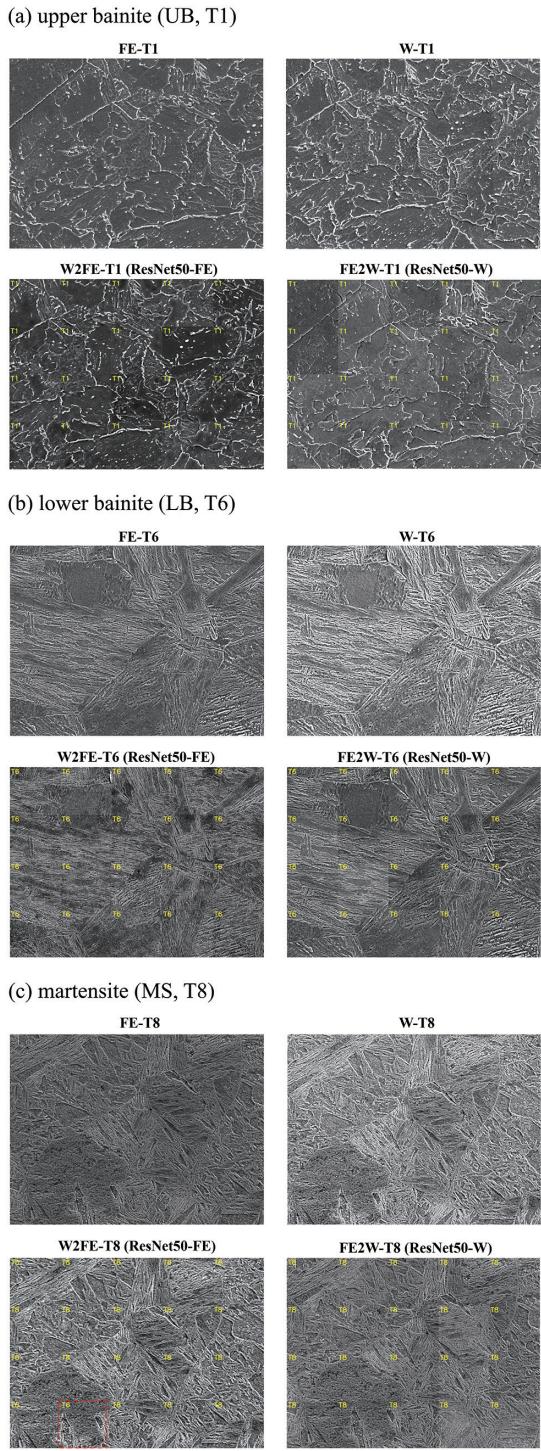


図 14 重複視野における (a) UB(T1), (b) LB(T6), および (c) MS(T8) の FE-SEM および W-SEM 画像
上段の 2 画像はオリジナル, 下段はスタイル変換後の FE-SEM および W-SEM 画像。赤枠の付記した小画像は変換後のドメインにて訓練された ResNet50 が誤識別したもの。
Tsutsui et al. (2025)¹⁴⁾ より, 許諾の元転載
FE-SEM and W-SEM images obtained from the same field of view of (a) UB (T1), (b) LB (T6), and (c) MS (T8). Two pictures at upper side in (a), (b), and (c) correspond to the original FE-SEM and W-SEM images, and those of the lower side correspond to the translated images (left: W2FE, right: FE2W generators). Mini-images with a red dashed line represent incorrect prediction by the ResNet50 trained on the corresponding domain.
Source: reproduced from Tsutsui et al. (2025)¹⁴⁾, with permission

4.4 結果の議論および将来の展望

本研究では、種々の熱処理を施した 8 種の低炭素鋼に対して、EBSD および SEM 測定によりデータセットを作成し、それらに機械学習技術を適用することで以下の結果を得た。

(1) 特微量抽出と ML モデルによるアプローチでは、EBSD 解析から得られる KAM とバリアント境界密度を訓練した SVM モデルを活用することで、ミクロ組織図を構築できることを示した。さらに、SEM のデータセットに対しては、GLCM 特微量と決定木ベースの ML モデルを組み合わせることで、最大で 87.5% の精度が得られることを確認した。

(2) DL モデルを用いた画像識別のアプローチでは、(1)よりも高い、90% 以上の精度を確認した。さらに、LIME 法を用いて DL モデルの識別根拠を可視化したところ、鉄鋼ミクロ組織の目視識別基準と整合する領域を重視していることを見出した。

さらに、SEM データセットを用いた(1)および(2)のアプローチにおいて、訓練データとテストデータの撮影条件の差異が、識別精度を損なうこともわかった。そこで、cycleGAN を用いたスタイル変換により、上述の性能劣化を緩和できることを示した。以下では、これらの結果を踏まえて、将来に向けた技術展望を述べる。

本研究では、比較的少数の識別カテゴリを持つデータセットへの機械学習技術の適用を試行し、高い識別精度を確認した。このことは、適切なデータセットを構築した上で、局所的なタスクに特化した ML もしくは DL モデルを訓練することで、実用的な性能を確保できることを示唆している。一方で、実際の製造現場では、これよりもはるかに多様な取得条件、形式、対象、想定タスクを内包したデータセットへの適用が求められる。

これらの多様なデータセットに対応した数理的モデルを構築することは容易ではないが、現在の有望な方策として、基盤モデル⁴³⁾の一つである Large Language model (LLM) を活用することが挙げられる⁴⁴⁾。LLM は文書生成、要約、および質問応答などを行える大規模モデルの総称であり、chatGPT⁴⁵⁾や DeepSeek⁴⁶⁾がその典型例である。これらのモデルは、いずれも self-attention 機構を持つ LLM モデルである。特に、chatGPT は入力されたテキストから生成したプロトコルを外部の拡散モデルに送信することで、画像の生成機能を保持している。また、DeepSeek は expert network と呼ばれる特定分野の回答に特化したネットワークを複数保持することで、高い精度と回答速度を実現しており、このような構成は Mixture of Experts (MoE) と呼ばれる⁴⁷⁾。

実際に、特定の企業やコミュニティでの利用に特化するように LLM モデルを訓練する方法も提案されている^{48, 49)}。例えば、LLM モデル内に小規模なネットワーク (Adapter)

を追加して、その部分のみを訓練する Adapter Injection が挙げられる⁵⁰⁾。さらに、特定の分野の知識に優れた MoE を構成し、既存の LLM モデルに組み込む試みも行われている⁵¹⁾。実際に、鉄鋼材料も含め材料科学の分野にも LLM の適用^{52,53)}は進められており、今後の進展が大いに期待されている。以上の文脈を踏まえると、本研究の結果は、製鉄業における最終的な製品である鉄鋼材料の、識別や解釈を担う expert network および Adapter 構築の端緒を開いたとも解釈できる。

最後に、本研究にて構築した高精度な機械学習モデルは、適切なデータセットを構築するための測定技術や、結晶学や形態論的な知見の蓄積に支えられていることを強調しておく。上記の LLM を用いた展望に関して、高精度な測定データを収集する基盤がなければ実現は困難である。本研究領域のさらなる発展には、鉄鋼材料に対する材料科学的な理解と、機械学習を始めとする情報科学的なアルゴリズムの相補的な進展が必要不可欠である。

5. 結 言

本報では、我々の研究グループが行ってきた低炭素鋼ミクロ組織の機械学習技術を用いた取り組みに関して概観した。マルテンサイトやベイナイトを含む 8 種の鋼材から、EBSD および SEM を用いてデータセットを構築し、(1) 特徴量抽出による ML モデルの構築、(2) SEM 画像による DL モデルの構築、の 2 つのアプローチをとった。結果として、以下の知見を得た。

- (i) EBSD の結晶方位マップから算出したバリエント境界密度と KAM 値を用いて訓練した ML モデルを用いることで、ミクロ組織図の構築が可能なことがわかった。
- (ii) SEM 画像から、ミクロ組織形態を反映した特徴量の抽出方法として GLCM 法を用いて、ML モデルを訓練し、最大で 87.5% の識別精度を確認した。さらに、識別に寄与する特徴量は平坦さに相当する homogeneity であった。この特徴量は α' 粒や炭化物の大きさに応答する特徴量であり、目視による識別基準と整合する結果であった
- (iii) SEM 画像を用いた DL モデルの適用では、90% 以上の識別精度を発揮した。さらに、LIME 法を用いることで、DL モデルが炭化物やラスの起点といった、目視識別にて注目する箇所を重視していることを見出した。
- (iv) (ii) や (iii) において、訓練データとテストデータの差異によって、訓練済モデルの精度が著しく低下する問題を見出した。それは正方法として、GAN に基づくスタイル変換により、精度を復元できることを見出した。

以上の知見は、適切なデータセットを構築した上で、局所的なタスクに特化した ML もしくは DL モデルを訓練することで、実用的な精度を担保できることを意味する。こ

れらを活用した鉄鋼材料に特化した LLM モデルの構築など、今後さらなる展開が期待される。

謝 辞

本研究の实行にあたり、日鉄ソリューションズ(株)中尾裕也氏からは、数々の有益なご助言、ご支援を賜りました。この場を借りて御礼申し上げます。

参考文献

- 1) Jorge, J.C.F. et al.: *J. Mater. Res. Technol.* 10, 471-501 (2021)
- 2) Tasan, C.C. et al.: *Annu. Rev. Mater. Res.* 45, 391-431 (2015)
- 3) Bramfitt, B.L., Speer, J.G.: *Metall. Trans. A* 21, 817-829 (1990)
- 4) Morito, S. et al.: *Acta Mater.* 54 (19), 5323-5331 (2006)
- 5) Tsutsui, K. et al.: *ISIJ Int.* 64 (11), 1619-1640 (2024)
- 6) Terasaki, H. et al.: *Mater. Charact.* 129, 305-312 (2017)
- 7) Tsutsui, K. et al.: *Comput. Mat. Sci.* 159, 403-411 (2019)
- 8) 筒井和政 ほか : *CAMP-ISIJ.* 32 (2), 618 (2019)
- 9) 寺崎秀紀 ほか : *溶接学会誌.* 88 (7), 536-539 (2019)
- 10) Tsutsui, K., Moriguchi, K.: *Calphad.* 74, 102303 (2021)
- 11) Tsutsui, K. et al.: *Mater. Today Comm.* 25, 101514 (2019)
- 12) Maemura, T. et al.: *Mater. Trans.* 61 (8), 1584-1592 (2020)
- 13) Tsutsui, K. et al.: *Mater. Today Comm.* 32, 104062 (2022)
- 14) Tsutsui, K. et al.: *Mater. Trans.* 66 (8), 941-952 (2025)
- 15) Gourgues, A.-F. et al.: *Mater. Sci. Technol.* 16 (1), 26-40 (2000)
- 16) Terasaki, H. et al.: *Metall. Trans. A* 48 (12), 5761-5765 (2017)
- 17) Takayama, N. et al.: *Acta Mater.* 60 (5), 2387-2396 (2012)
- 18) Morito, S. et al.: *Mater. Today: Proc.* 2, S913-S916 (2015), International Conference on Martensitic Transformations, ICOMAT-2014, Bilbao, Spain, (2014)
- 19) Haralick, R.M.: *Proc. IEEE.* 67 (5), 786-804 (1979)
- 20) Haralick, R.M. et al.: *IEEE Trans. Syst. Man Cybern. SMC-3*, 6, 610-621 (1973)
- 21) Webel, J. et al.: *Mater. Charact.* 144, 584-596 (2018)
- 22) Gola, J. et al.: *Comput. Mater. Sci.* 160, 186-196 (2019)
- 23) Ojala, T. et al.: *Proceedings of 12th International Conference on Pattern Recognition*, Jerusalem, Israel, vol.1, 582-585 (1994)
- 24) Ojala, T. et al.: *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence.* 24 (7), 971-987 (2002)
- 25) Decost, B.L. et al.: *Acta Mater.* 133, 30-40 (2017)
- 26) Vapnik, V., Lerner, A.: *Autom. Remote Control.* 24, 774-780 (1963)
- 27) Boser, B.E. et al.: *Proceedings of the Fifth Annual Workshop on Computational Learning Theory*, COLT '92, ACM, New York, USA, 144-152 (1992)
- 28) Breiman, L.: *Mach. Learn.* 45 (1), 5-32 (2001)
- 29) Ke, G. et al.: *LightGBM: A Highly Efficient Gradient Boosting Decision Tree*. *Advances in Neural Information Processing Systems.* 3149-3157 (2017)
- 30) He, K. et al.: *Proceedings of the IEEE Conference on Computer*

- Vision and Pattern Recognition (CVPR), 770-778 (2016)
- 31) Ribeiroet, M.T. al.: KDD '16: Proceedings of the 22nd ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining, New York, United States, 1135-1144 (2016)
- 32) Zhu, J.-Y., Park, T., Isola, P., Efros, A.A.: arXiv:1703.10593 (2017)
- 33) Bishop, C.M.: Pattern Recognition and Machine Learning. Springer, 2006
- 34) Goodfellow, I., Bengio, Y., Courville, A.: Deep Learning, Adaptive Computation and Machine Learning series. MIT Press, 2016
- 35) Neubert, P., Protzel, P.: Compact Watershed and Preemptive SLIC: On Improving Trade-offs of Superpixel Segmentation Algorithms. ICPR 2014, 996-1001 (2014)
- 36) Lee, J.-W., Goo, N.H., Park, W.B., Pyo, M., Sohn, K.-S.: Eng. Rep. 3, e12274 (2021)
- 37) Isola, P. et al.: arXiv:1611.07004 (2016)
- 38) Nain, A.K.: <https://keras.io/examples/generative/cyclegan/> (cited 2025 08-31)
- 39) Nain, A.K.: <https://github.com/keras-team/keras-io/blob/master/examples/generative/cyclegan.py> (cited 2025-08-31)
- 40) Zhang, B. et al.: Rapid Prototyp. J. 25 (2019)
- 41) Upton, G., Cook, I.: Understanding Statistics. OUP Oxford, 1996
- 42) Van der Maaten, L., Hinton, G.: J. Mach. Learn. Res. 9, 2579-2605 (2008)
- 43) Bommasani, R. et al.: arXiv:2108.07258 (2018)
- 44) Vaswani, A. et al.: Attention is all you need. Advances in Neural Information Processing Systems (NeurIPS), 30, (2017) <https://arxiv.org/abs/1706.03762> (cited 2025 08-31)
- 45) Radford, A. et al.: Improving language understanding by generative pre-training. OpenAI Technical Report. (2018) https://cdn.openai.com/research-covers/language-unsupervised/language_understanding_paper.pdf (cited 2025 08-31)
- 46) Liu, A. et al.: arXiv:2405.04434 (2024)
- 47) Dai, D. et al.: arXiv:2401.06066 (2024)
- 48) Leng, J. et al.: Adv. Eng. Informatics. 65, A, 103179 (2025)
- 49) Hegiste, V. et al.: arXiv:2306.17645 (2023)
- 50) Hu, E.J. et al.: arXiv:2106.09685 (2021)
- 51) Souza, F. et al.: arXiv:2211.00558 (2022)
- 52) Tian, S. et al.: Acta Mater. 285, 120663 (2025)
- 53) Jiang, X. et al.: npj Comput. Mat. 11, article no.79 (2025)



筒井和政 Kazumasa TSUTSUI
先端技術研究所 数理科学研究部
主幹研究員 博士(理学)
千葉県富津市新富20-1 〒293-8511



林宏太郎 Koutarou HAYASHI
先端技術研究所 解析科学研究部
課長 博士(工学)



森口晃治 Koji MORIGUCHI
日鉄テクノロジー(株)
サステナビリティソリューション事業部
産業・資源循環技術部
統括主幹 博士(工学)



森戸茂一 Shigekazu MORITO
島根大学 材料エネルギー学部
教授 博士(工学)



寺崎秀紀 Hidenori TERASAKI
熊本大学 大学院自然科学研究科
教授 博士(工学)