

# 3D-Gefügeforschung und neue Möglichkeiten der zuverlässigen Gefügeklassifizierung durch Kombination mit maschinellem Lernen

Gola, J.; Britz, D.; Mücklich, F. (1)

Für die systematische Qualitätskontrolle der Werkstoffeigenschaften und Werkstoffentwicklung ist die zuverlässige Gefügebeurteilung sowohl in 2D aber insbesondere auch in 3D ein nützliches Werkzeug. Bisher waren Mittelwerte oder Verteilungsfunktionen für die einfacheren Gefügeparameter wie beispielsweise Korngrößen, Kornformen, Phasenanteile, Texturen und deren Verknüpfung die ausreichenden Angaben. In dem Maße, wie die zulässigen Toleranzbereiche der Gefüge immer enger gefasst werden müssen, um ein gezieltes Eigenschaftsspektrum zu sichern, wird die Komplexität der Verknüpfung der damit im Zusammenhang stehenden Gefügeparameter immer wichtiger.

In dem Artikel werden neue Lösungswege, basierend auf den Methoden des maschinellen Lernens vorgestellt, die eine reproduzierbare und objektive Gefügeklassifizierung ermöglichen. Es wird anhand der Modellmaterialien Gusseisen und Stahl dargelegt, wie eine Klassifizierung mit Data Mining Methoden, auf der Basis von traditionellen Gefügeparametern, und mittels Deep Learning möglich ist. Außerdem wird der Mehrwert von 3D-Tomographien für die Gefügeklassifizierung erläutert.

Prozessparametern der Herstellung und den Eigenschaften eines Materials – kann als außerordentlich reichhaltiger Multiskalenspeicher verstanden werden (Bild 1). Alle Parameter, die während des Herstellungsprozesses eines Materials eingestellt werden, sind in dessen Gefüge gegebenenfalls auf verschiedenen Skalen gespeichert. Nur wenn es gelingt, diesen Speicher bestmöglich auszulesen, ist eine präzise und gezielte Einstellung von Eigenschaften möglich. Daraus abgeleitet hat sich der Begriff des gefügebasierten Werkstoffdesigns etabliert. Denn nur wenn wir in der Lage sind, das Gefüge mit seinen mitunter sehr komplexen und kleinsten Bestandteilen vollständig zu erfassen und beschreiben zu können, kann die Optimierung bestehender und Entwicklung neuer Werkstoffe gelingen. Gleichzeitig bietet dieser Ansatz die Möglichkeit, gezielte Modellierungen und Simulationen durchzuführen, um die Werkstoffentwicklung noch effizienter gestalten zu können.

Die Gefügecharakterisierung bildet die Voraussetzung zur Gefügebewertung und -Klassifizierung. Die gängige Praxis in der Industrie besteht aus der subjektiven Bewertung lichtmikroskopischer Gefügebildungen gemäß Normvorgaben und Richtreihen. Dass eine solche subjektive Beurteilung zu Problemen führen kann, wird vor allem bei komplexen Gefügen deutlich. In diesem Fall beurteilt jeder Experte die Bestandteile (sog. Objekte) auf den Mikroskopaufnahmen nach seinem Wissen und Erfahrungsschatz. Die Zuordnung der Objekte in eine Klasse ist nicht mehr eindeutig. Eine solche Unein-

Die potentielle Vielfalt an Materialien scheint nicht zuletzt durch die Vielfalt ihrer Gefüge heutzutage unbegrenzt. Die Auswahl des auf die jeweilige Anwendung angepassten Werkstoffgefüges ist daher essentiell. Insbesondere die Metalle sind dabei nach wie vor von herausragender Bedeutung, da sie in sämtlichen Anwendungsbereichen – von der Automobilbranche bis hin zur Architektur – unverzichtbar sind. Über die genaue chemische Zusammensetzung der Legierungen in Kombination mit einer präzisen Prozessführung können die für den jeweiligen Einsatzbereiche notwendigen Eigenschaften gezielt eingestellt werden. Der traditionelle Ansatz um Werkstoffe zu verbessern, besteht darin, empirisch die Legierungszusammensetzung zu verändern und am fertigen Produkt die Eigenschaften zu testen. Diese Kenngrößen werden evaluiert, im besten Fall in neuronalen Netzen gespeichert und somit ein Erfahrungsschatz aufgebaut.

In diesen Ansätzen wird das Gefüge zur Eigenschaftsoptimierung jedoch weitestgehend vernachlässigt. Das Gefüge – als das entsprechende Bindeglied zwischen

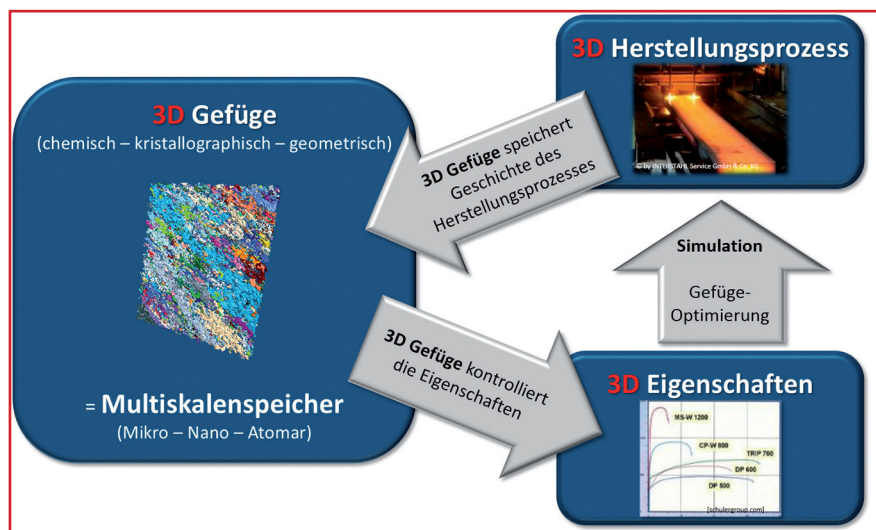


Bild 1: Das Gefüge stellt als Multiskalenspeicher die Verknüpfung zwischen Herstellung und Eigenschaften dar. Über geeignete Modellierungs- und Simulationsansätze kann der gesamte Werkstoffzyklus iterativ verbessert werden.

deutigkeit wird durch die Beurteilung auf 2D-Mikroskopaufnahmen noch einmal verschärft, wenn je nachdem aus welcher Richtung die Gefügebestandteile angeschnitten wurden, das ein oder andere Merkmal eine größere Gewichtung erhält. Oft entstehen abweichende Meinungen zur gleichen Mikroskopaufnahme, was vor allem in der Qualitätskontrolle zu Schwierigkeiten führen kann. Dass dieses Problem der stark subjektiven Komponente bei der Klassifizierung von Gefügen einerseits und bei Hochleistungswerkstoffen mit immer enger werdenden Gefügetoleranzen andererseits ebenfalls vorliegt, konnte in zahlreichen Ringversuchen demonstriert werden. Die gleichen Gefügaufnahmen wurden verschiedenen Experten zur Bewertung vorgelegt und es konnten erhebliche Streuungen festgestellt werden [1, 2].

Diese Studien zeigen deutlich die Notwendigkeit objektiver und reproduzierbarer Klassifizierungsmethoden. Die modernen Methoden der Informatik bieten dazu neue Ansätze. Seit der Entwicklung der künstlichen Intelligenz um 1950 mit der Möglichkeit, Rechenaufgaben zu lösen oder Schachspiele gegen den Computer zu spielen, haben sich diese Methoden stetig weiterentwickelt. Der erste Meilenstein zur Generierung von neuem Wissen war das maschinelle Lernen, welches um 1980 entwickelt wurde. Dadurch war es erstmals möglich, in großen Datenmengen nach Vernetzungen und Verbindungen zu suchen und Modelle zu erstellen, die ein neues und übergeordnetes Wissen erzeugten. Diese Methoden, welche Entscheidungsbäume, Cluster oder andere Verfahren der Datentrennung nutzen, werden unter Data Mining zusammengefasst [3]. Die neuesten Entwicklungen in der Informatik, die z.B. auch Bereiche wie Gesichtserkennung revolutioniert haben, sind selbstlernende Systeme (Deep Learning). Diese Systeme beruhen auf Algorithmen, die in der Funktionsweise unserem Gehirn nachempfunden sind und somit in der Lage sind, aus Bildern und Daten Informationen zu extrahieren, zu bewerten und das Wissen zu vergrößern [12].

Derartige Ansätze können auch die Gefügeklassifizierung maßgeblich verbessern und objektiveren, sodass reproduzierbare und objektive Ergebnisse erzielt werden können. Letztlich kann so eine gezielte und präzise Weiterentwicklung und auch die adäquate Qualitätskontrolle von Werkstoffen gewährleistet werden.

### Objektive Klassifizierung mittels Data Mining und der Mehrwert der 3D Gefügeforschung

Ein Ansatz, um eine Klassifizierung zu objektivieren, ist Data Mining Methoden mit traditionellen Morphologie- und Textur-Parametern zu kombinieren [4]. Diese Objekt-Parameter können mittels Bildanalyseprogrammen aus den lichtmikroskopischen und elektronenmikroskopischen Aufnahmen verschiedener Gefügeklassen ausgelesen werden. In der Vergangenheit hat sich gezeigt, dass es nicht den einen Parameter gibt, der es erlaubt, Gefüge bzw. Gefügebestandteile verschiedener Klassen sicher voneinander zu trennen. Wenn man jedoch eine hinreichende Vielfalt von  $n$  Parametern berücksichtigt und daraus einen  $n$ -dimensionalen Parameterraum konstruiert, so entspricht jedem einzelnen Abbild eines ggf. komplex geformten Objektes ein in seiner Position wohldefinierter Punkt im  $n$ -dimensionalen Raum. Alle geometrisch ähnlichen Objekte bilden eine „Wolke“ benachbarter Punkte in diesem  $n$ -dimensionalen Parameterraum. Somit gelingt eine eindeutige Abgrenzung ähnlicher Objekte (Klasse A) gegenüber anderen (z.B. Klasse B und Klasse C) durch die Konstruktion einer Hyperebene. Dies ist vereinfacht dargestellt die Grundlage des Stützvektorverfahrens (englisch: Support Vector Machine, abgekürzt SVM). Zum Anpassen des SVM-Modells können für eine Gefügeklassifizierung die gemessenen morphologischen Daten verwendet werden, von denen man durch eine Expertenmeinung eindeutig weiß, zu welcher Klasse sie gehören (gelabelte Daten = Trainingsdaten). Das fertige Modell auf Basis der Trainingsdaten kann auf die Daten einer neuen Aufnahme angewendet werden und ermöglicht eine Klassifizierung unbekannter Gefüge.

Diese Methode konnte beispielsweise genutzt werden, um verschiedene Gusseisentypen, die durch unterschiedliche Morphologien des Graphits traditionell mittels Richtreihen unterschieden werden, zu objektivieren [5]. Graphit in Gusseisen ist ein gutes Beispiel für die Bedeutung der morphologischen Gefügevielfalt für die Eigenschaften. Gusseisen mit sog. Vermiculargraphit hat eine wesentlich höhere Festigkeit als Gusseisen mit Lamellengraphit. Letzteres hat hingegen eine höhere Duktilität. Gusseisen ist auch deshalb ein gutes Modellmaterial, weil wegen der starken lichtoptischen Kontraste zwischen

Eisen und Graphit ohne zusätzliche metallographische Maßnahmen bildanalytisch ausgewertet werden kann. Um maßgeschneiderte Eigenschaften erfüllen zu können, zeigen moderne Gusseisengefüge nicht nur Objekte einer bestimmten Klasse sondern meistens eine Vielzahl von Graphitmorphologien in einem Mischgefüge. Hierbei ist vor allem der Phasenanteil der verschiedenen Klassen von großer Bedeutung bei der Klassifizierung des Gefüges. Im Fall von Gusseisen konnte mittels eines SVM-Modells eine Klassifizierungsgenauigkeit von über 90 % erreicht werden. Die Ergebnisse flossen schließlich auch in eine Software zur automatischen Gusseisenklassifizierung namens POCA ein [2].

Auch im Bereich komplexerer Gefüge wie z.B. bei zweiphasigen Stählen ist eine objektive Klassifizierung der Gefügebestandteile der Schlüssel zum Erfüllen hoher Qualitätsstandards und Entwicklung neuer Güten. Ähnlich wie bei Gusseisen unterscheiden sich zweiphasige Stähle durch die Morphologie der auftretenden Phasen. Allerdings bilden sich bei Stahl in den verschiedenen Phasen Substrukturen aus, welche maßgeblich zur Unterscheidung verschiedener Bestandteile sind. Diese Substrukturen, die durch angepasste Kontrastierungen sichtbar gemacht werden müssen [6], sind oftmals in einer Größenordnung, dass sie in lichtmikroskopischen Untersuchungen nicht mehr aufgelöst werden können und zur genauen Untersuchung elektronenmikroskopische Aufnahmen genutzt werden müssen. Im Gegensatz zu Gusseisen gestaltet sich das Auslesen der Gefügeparameter bei Stählen schwieriger. Neben den morphologischen Daten aus den lichtmikroskopischen Aufnahmen müssen zusätzlich die Informationen der Substruktur aus den elektronenmikroskopischen Aufnahmen für jedes Objekt ausgelesen werden. Die Graustufenaufnahmen aus dem Elektronenmikroskop eignen sich sowohl zur Auswertung morphologischer Substrukturparameter ([7]) als auch für pixelbasierte Texturparameter ([8]). Mit diesen Parametergruppen der Phasen und Substrukturen lassen sich für zweiphasige Stähle Klassifizierungsgenauigkeiten von bis zu 90% für die drei Hauptklassen Martensit, Bainit und Perlit erzielen [7].

Bei sämtlichen 2D-Klassifizierungen vor allem von komplex geformten Gefüge-Objekten ist jedoch zu beachten, dass durch den metallographischen Schnitt nur ein 2D-Schnitt mit dem entsprechenden Infor-

