

## データ科学を使った各種分析データ解析

### Extraction of Information from the Materials Analysis Data by using Data-science

(株)コベルコ科研 計算科学センター °世木 隆

KOBELCO RESEARCH INSTITUTE, INC. Computational Science Department, °Takashi Segi

E-mail: segi.takashi@kki.kobelco.com

**緒言** 新規材料を効率的に探索する上で、材料探索の自動化や高速化が求められている。一方で、合成された素材の特性や構造情報を取得する為に多くの分析技術が使われているが、その解析は熟練と手作業に頼る部分が多く、依然として高速化が求められている。今回、無機物や構造材料に対する適応事例について紹介し、残された課題について紹介する。

**事例 1.** 鋼材表面では、温度、pH、塩素などの共存イオンに依存して多くのさびが得られる。例えば、初期において Green Rust と呼ばれるコロイド状中間体が出現し、熟成期間により  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  や Goethite、Lepidocrocite、そして Akaganeite と呼ばれるオキシ水酸化物が得られる。 $\mu$  オーダーの顕微 X 線回折法を適用すれば塩水暴露面の違いによる局所的なさび生成物の違いが判るが、問題は計測データが大量になる為に解析者の負担が大きくなる点である。森らは、 $250\mu\text{m}$  四方に  $1\mu\text{m}$  径の X 線を用い 63,001 点の回折パターンを集め、次にラベルデータを取得する為に 60 点の計測結果を同定し、人工ニューラルネットによる分類問題を適用した[1]。このアプローチでは格子定数や空間群は抽出しないが、反対に莫大なデータのその場解析を可能にする為に、スクリーニング的な使い方が期待される。

**事例 2.** 炭素鋼は硬さを調節する為に焼き戻しを行うが、その際にセメントナイトなどが表面へ析出する。これら炭化物の数や大きさは重要な検査項目だが実際には球状以外に微粒子状が

多く解析者の大きな負担になっている。クロムモリブデン鋼(SCM435)における走査型電子顕微鏡像を Fig. 1 へ示したが、この微粒子状炭化物を機械学習により自動的に抽出した結果を黄色で示した。この計算は数秒で完了し、解析者の処理時間は 1/3 程度へ削減できた。

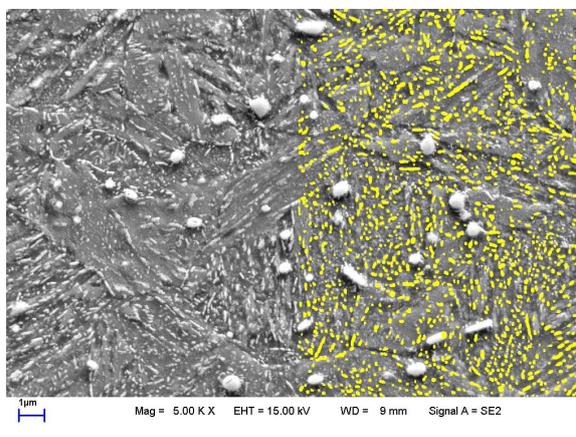


Fig. 1 Automatically extracted carbide particles on surface of the carbon steel.

**まとめ** 実際には前処理や測定条件により精度が左右される為、汎化性能向上にはロバスト性への考慮が欠かせない。予測結果は解析者による確認が求められるが、機械学習を用いた高速化は今後重要性が増していくと考えられる。

**文献** [1] 森 拓弥ら, "μ ビーム XRD による塗膜付き鋼材表面腐食生成物の深さ方向分布観察", 第 20 回サンビーム研究発表会, S05, 2020.

**謝辞** 本報告は、(株)神戸製鋼所 AI 推進プロジェクト部 片山 亮氏、浜元 和久氏の協力を得て推進いたしました。感謝します。