

令和元年度中性子イメージング専門研究会
R01/12/26

北海道大学の 中性子イメージング研究 2019

(北海道大学) 加美山 隆

1. 北海道大学加速器中性子源HUNS-2 の現況
2. 北大で最近実施されたイメージング研究
3. 北大のパルスイメージング解析に関する取り組み

令和元年のHUNS

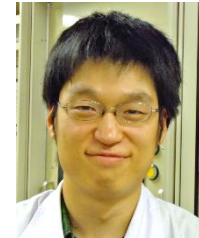
新スタッフ参戦！！

瞬間強力パルス状放射線発生装置研究室

スタッフ: 施設長(兼任) 加美山 隆

技術職員 **長倉 宏樹**

技術支援員 佐藤 孝一



フルパワー運転の開始！！

12月19日 18:08:10

北大LINAC-IIが3.0 kW

(32 MeV × 94 μA (100 pps)、

ほぼフルパワー)での安定利用運転に成功しました！北大LINAC-Iのほぼ3倍の出力です！



1. 北海道大学加速器中性子源HUNS-2 の現況
2. 北大で最近実施されたイメージング研究
3. 北大のパルスイメージング解析に関する取り組み

HUNSによる最近のパルス中性子イメージング

① ダマスカスナイフ

- ✓ 結晶組織, 結晶子サイズ (RITS)

② LTT (low transformation temperature) 溶接鋼

- ✓ 結晶相 (面間隔 / single Bragg-edge), 結晶組織 (RITS)

③ Ferrite / Austenite 相分率

- ✓ 結晶相分率解析 (RITS)

企業/海外との共同研究を含む。

(北大) 佐藤博隆、佐藤実有季

1. 北海道大学加速器中性子源HUNS-2 の現況
2. 北大で最近実施されたイメージング研究
3. 北大のパルスイメージング解析に関する取り組み

中性子透過法の特長と課題

中性子透過法

- ・試料深奥部の情報
- ・広い視野

他の手法に比べて、大体積の平均的な構造情報を得られることが大きな長所

⇒ **平均構造を可視化するモデリングに有利**

フラッグエッジ透過法

現状の解析コード: RITS

- ・多様な微細組織情報
- ・解析に手間がかかる

解析パラメータの初期値に左右される
=初期値決定が難しい

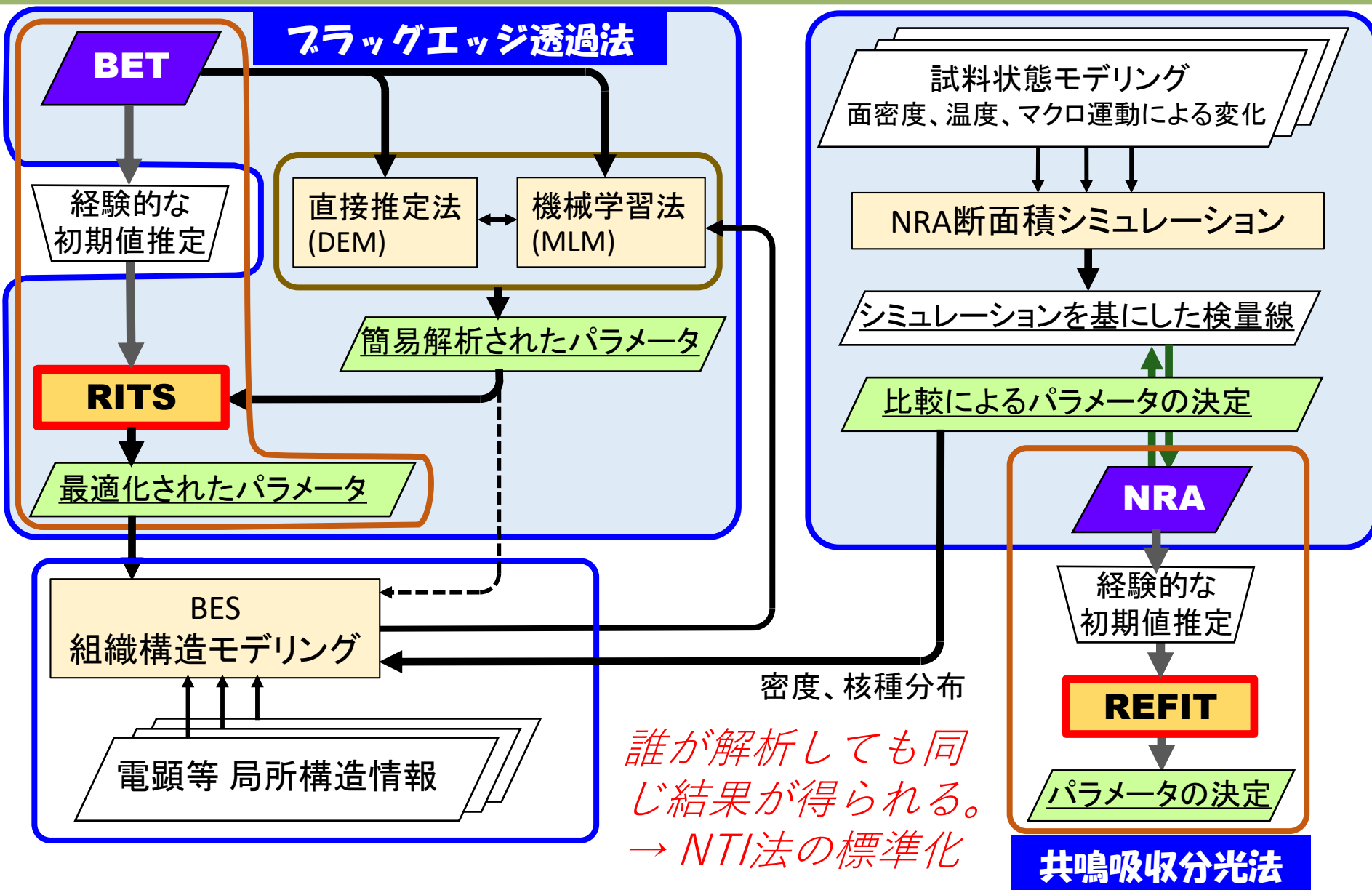
⇒ **初期値決定の簡易化が必要**

共鳴吸収分光法

現状の解析コード: REFIT

- ・核種個別の情報
 - ・原子ダイナミクス情報
 - ・スペクトル形状が様々な試料・ビーム条件に依存するためプロフィール解析が難しい
- ⇒ **試料状態を初期条件に含める解析法**

北大が取り組む透過スペクトル解析のロバスト化



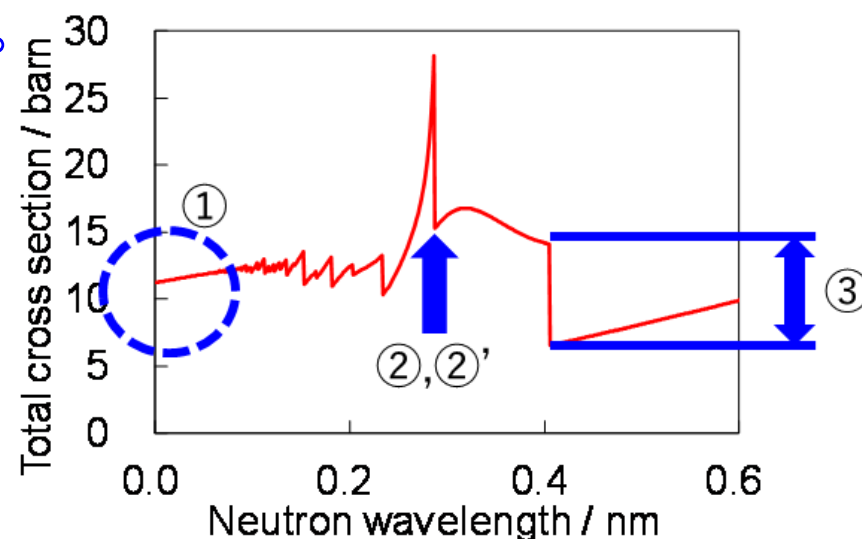
BEsp解析の簡易化～結晶組織情報の直接推定法

Ako Sakakibara, H. Sato (HUNS)

中性子透過率スペクトルからRITSを介さずに結晶組織構造パラメータの大まかな値を推定したい。

＝透過率スペクトルに現れる特徴点を評価して、初期値推定なしにスペクトルから構造パラメータを決める。

- ① 投影原子数密度
- ② March-Dollase係数
- ②' 選択配向ベクトル
- ③ 結晶子サイズ



実験による透過率スペクトルから結晶組織構造情報を直接推定する方法の開発

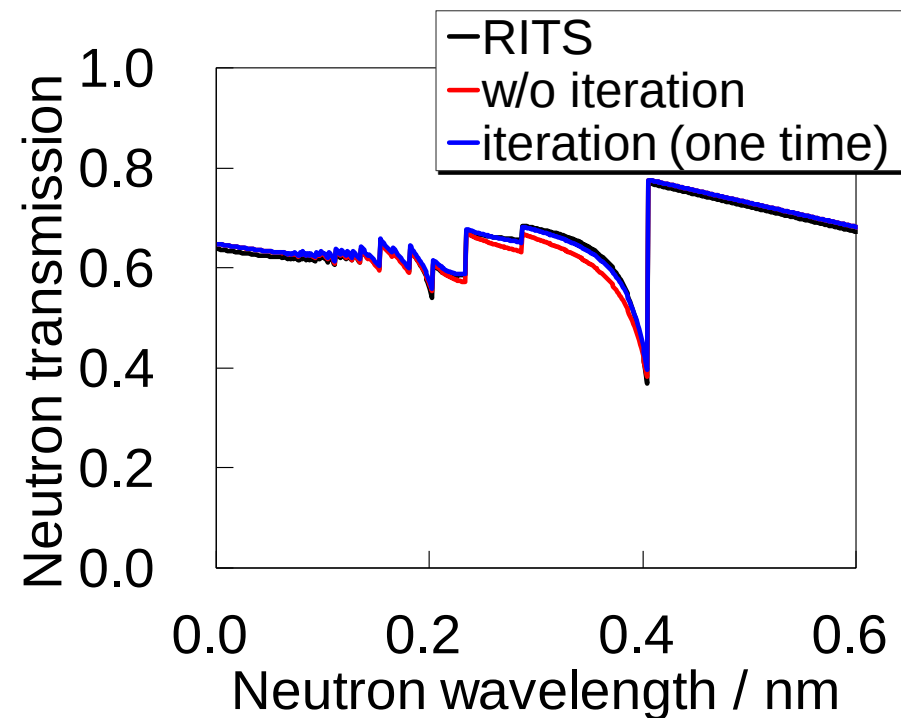
⇒ RITSの初期値として使える程度の推定精度

⇒ 誰が動かしても同じ結果が得られる

直接推定法による結晶組織パラメータの決定

直接推定法: ブラッグエッジ透過スペクトルから直接組織パラメータを決定。
フィッティング初期値決定に任意性が入らない。

RITSで任意にシミュレートした透過スペクトルに直接推定法を適用



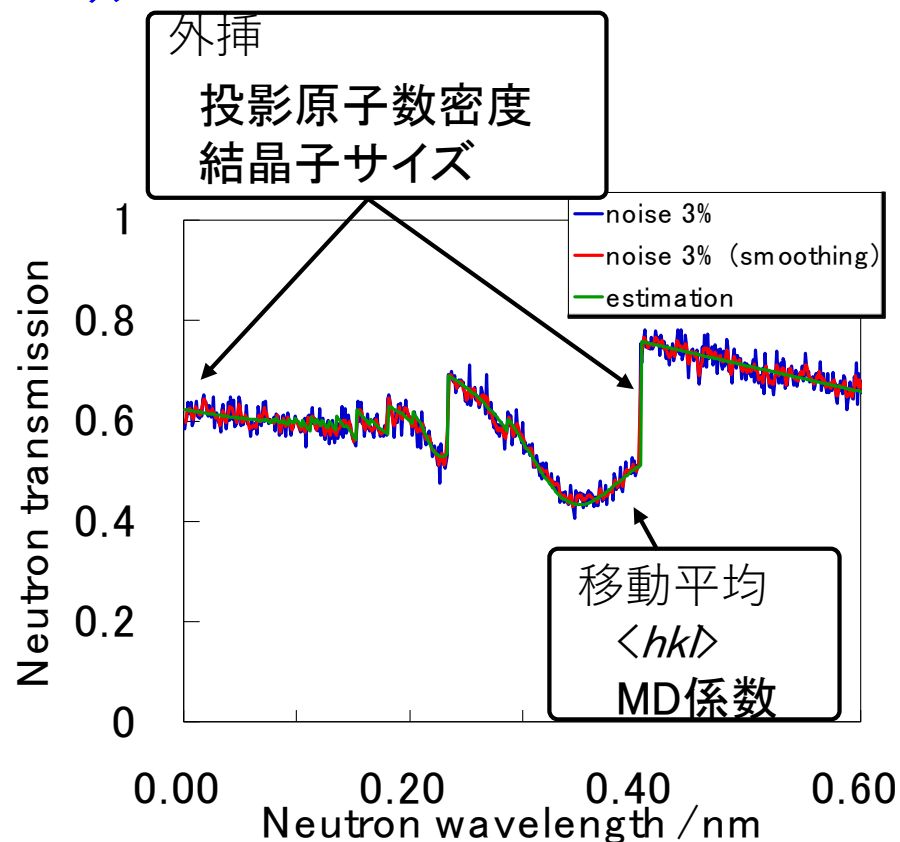
	設定値	直接推定	回帰推定
ρt [cm ⁻²]	4.00	3.86	3.86
R	0.45	0.50	0.47
$\langle HKL \rangle$	$\langle 110 \rangle$	$\langle 110 \rangle$	$\langle 110 \rangle$
S [μm]	4	2.67	3.49

結晶子サイズを考慮しながら、
再度推定を行うことで推定精度
が向上する。

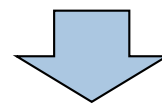
理想的な透過スペクトルではある程度良い精度の推定が可能。

統計誤差の影響

統計誤差 $\sigma = 3\%$ をのせたスペクトル



- ✓ ブラッグエッジ近傍や、 $\lambda = 0$ nm 近傍の透過率スペクトルは直線近似が可能
- ✓ 集合組織に起因するピーク ($0.286 \text{ nm} < \lambda < 0.404 \text{ nm}$) は、直線近似が不可能



統計誤差の影響を軽減

投影原子数密度
結晶子サイズ

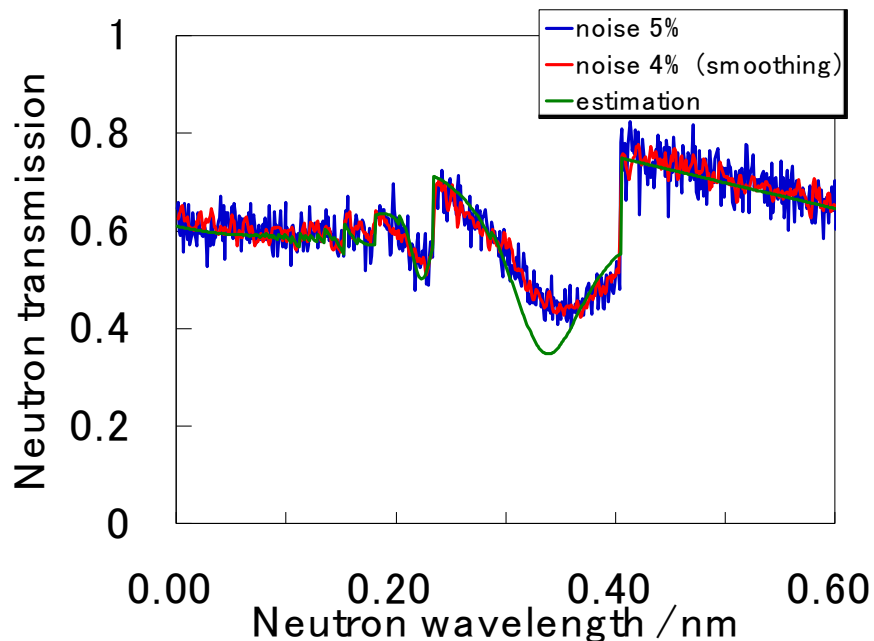
線形近似

優先方位
March-Dollase 係数

3点移動平均

$\sigma = 3\%$ については推定結果はRITSの初期値としては十分な精度

統計誤差 $\sigma = 5\%$



MD係数の誤差が
結晶子サイズへ伝搬？

	設定値	推定値 (w/o noise)
$\rho t [\text{cm}^{-2}]$	4.25	4.42
MD係数	0.4	0.3
$\langle HKL \rangle$	$\langle 111 \rangle$	$\langle 111 \rangle$
S^2	1	-4.69
$S [\mu\text{m}]$	1	虚数 $\Rightarrow 0$
エッジ高さ [barn]	9.38 (統計誤差無し の推定値)	9.31

エッジ高さ(結晶子サイズ)の
推定精度は比較的高い

$\Rightarrow$ パラメータ推定方法の改良中

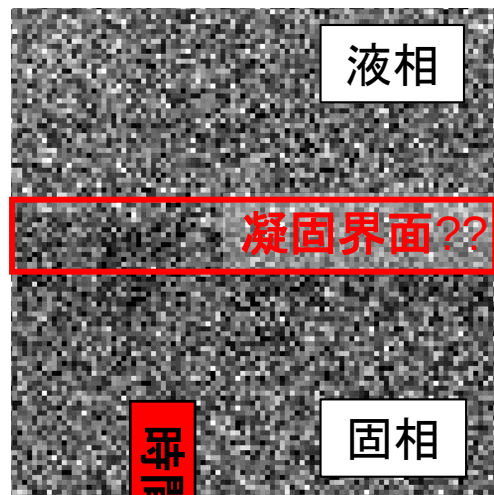
もう一つの可能性：機械学習による透過スペクトル解析

Syuma Hirano, H. Sato (HUNS), Kanta Ono (KEK), Daisuke Ito, Yasushi Saito (IIRNS)

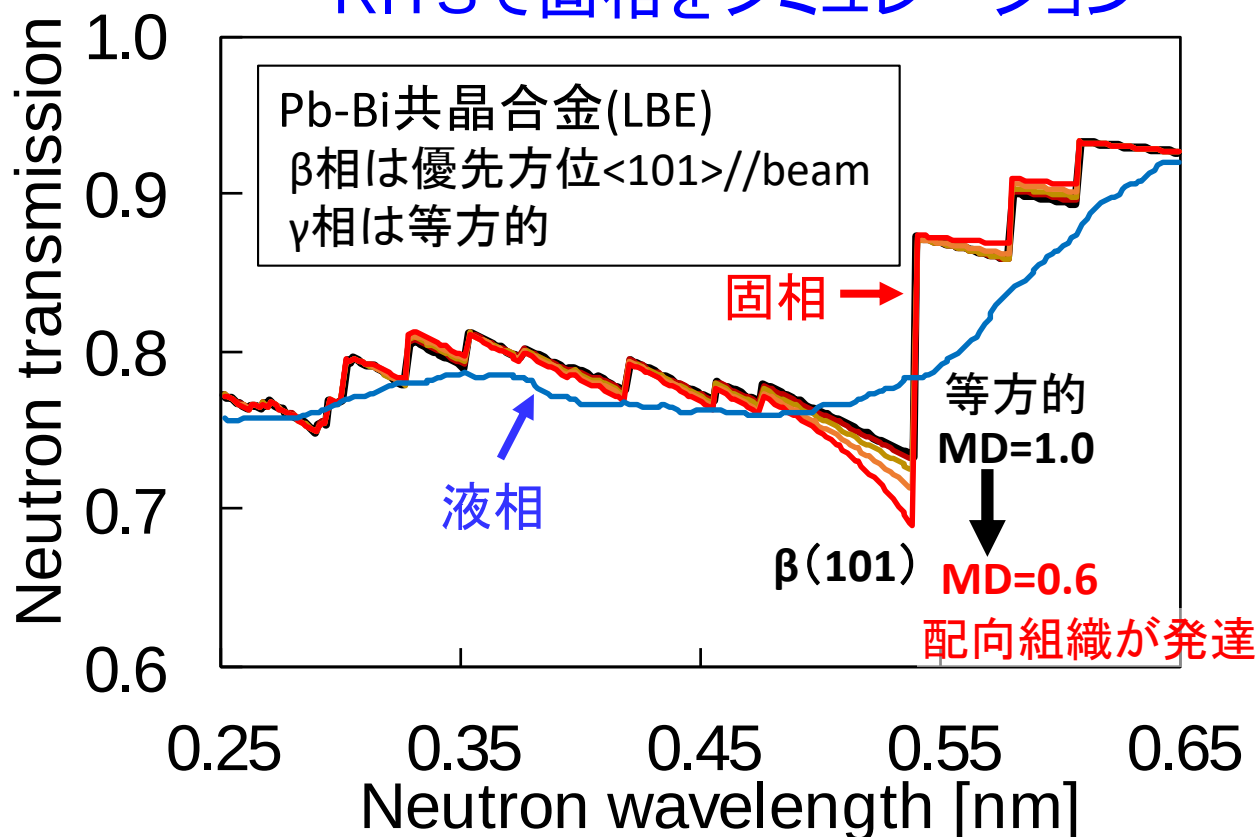
凝固界面固液相分率の解析

乱雑な凝固組織により
通常の解析が困難

中性子透過率スペクトルを用いて、相分率解析すること
で詳細な凝固界面の領域を特定。

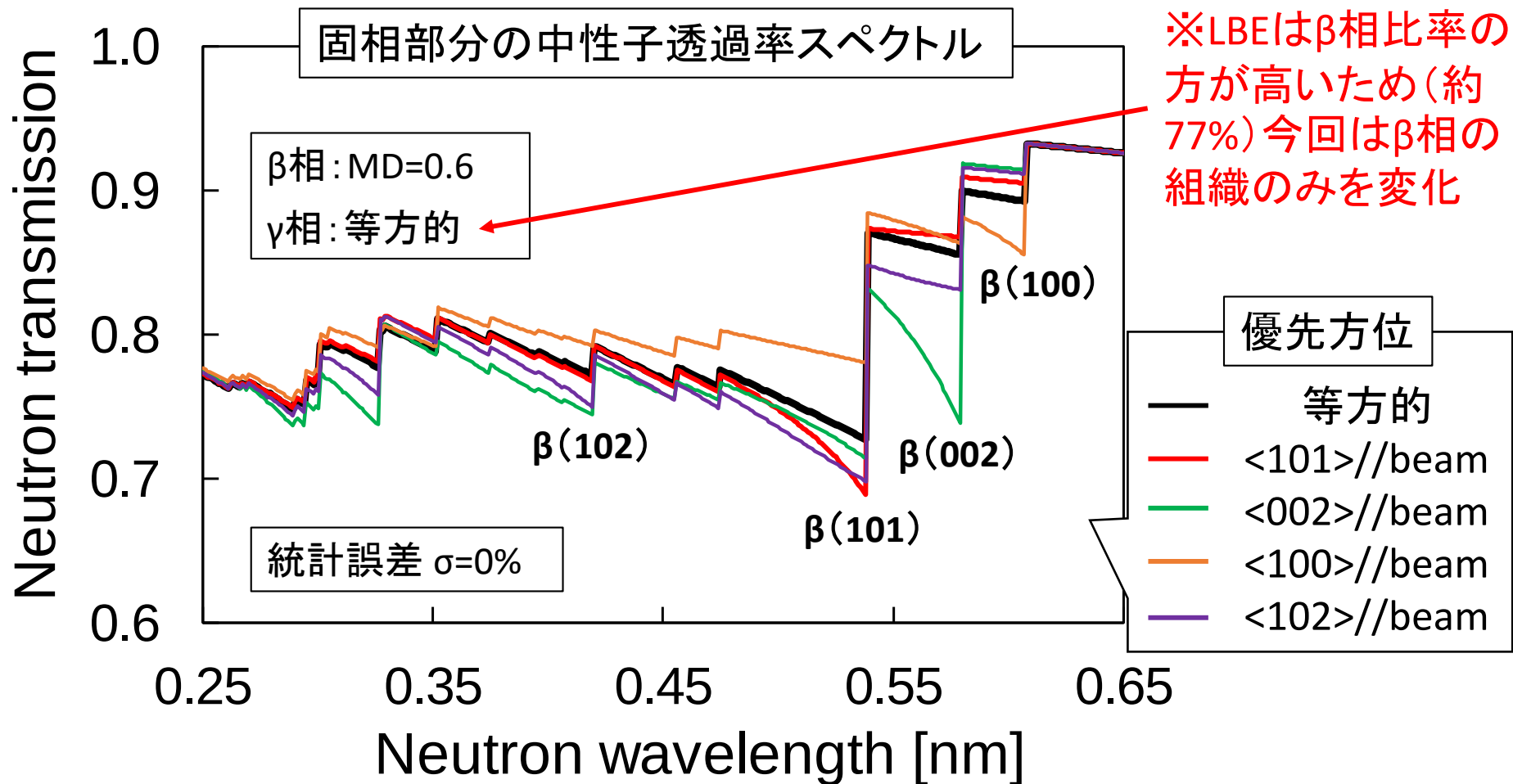


RITSで固相をシミュレーション



様々な組織をとる固相のLBEスペクトル

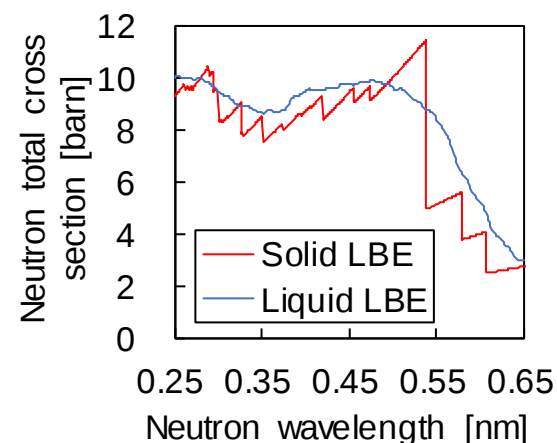
LBEの β 相の優先方位についても様々なパターンが考えられる。



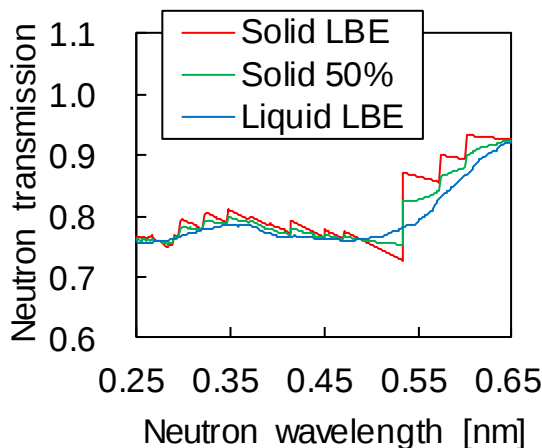
訓練・テスト用の中性子透過率スペクトルの作成方法

相分率や統計誤差について様々な種類のスペクトルを作成

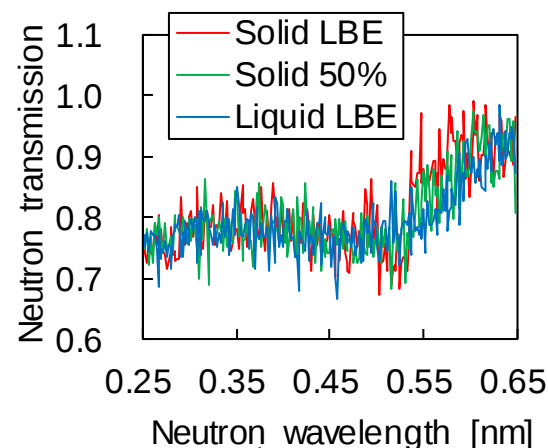
微視的中性子全断面積スペクトル



中性子透過率スペクトル



中性子透過率スペクトル



微視的中性子全断面積
固体のLBE

- ・RITSによる計算から取得
- 液体のLBE
- ・実験から取得

相分率

101種類 (0~100%)

統計誤差

10種類 (σ : 0~10%)

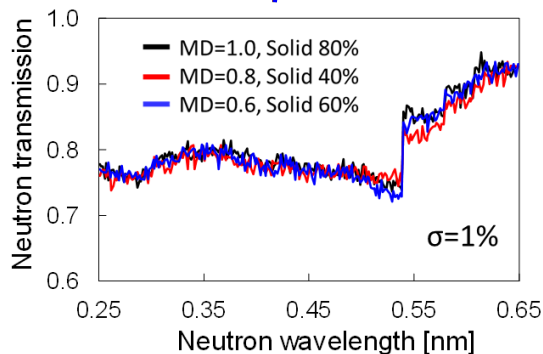
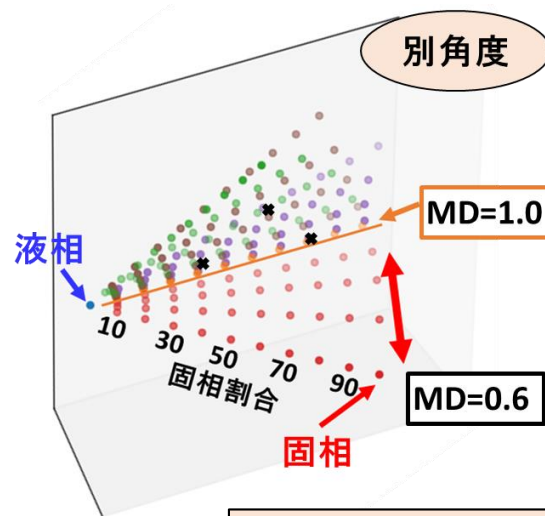
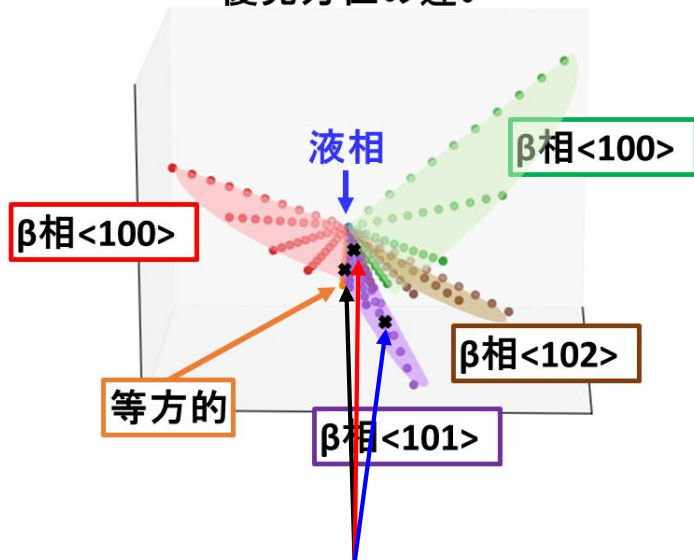
※ 訓練データ } 同一データセットから
テストデータ } ランダムに抽出

教師無し機械学習によるスペクトルの次元削減

固液割合を変えた中性子透過率スペクトル(>200点)をシミュレートし、主成分分析(PCA)により3次元化

- 優先方位をβ相の1種類に固定し、配向組織の発達度合いを変化させる。
- 固相・液相のスペクトルを混合させた。(0,10,...,90,100%)

優先方位の違い

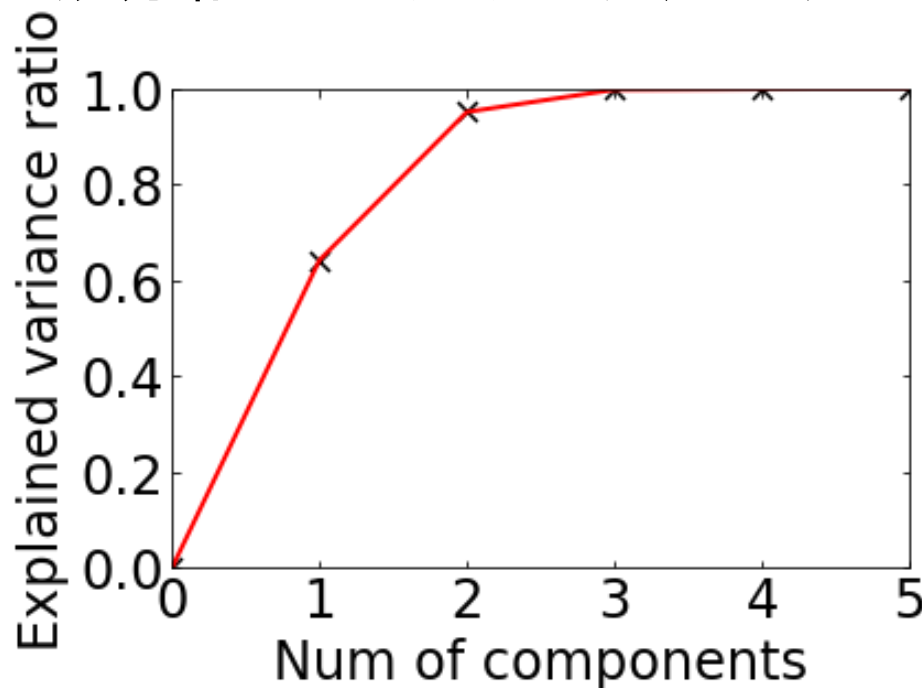


次元削減により、相分率や配向組織の発達度合い及びビーム方向に対する優先方位が異なるスペクトルを識別できる可能性あり。

固相の優先方位β相<101>のMD値と液相の割合を変えたテストデータ

スペクトルの最適な次元削減数についての検討

主成分軸1つで元データ(スペクトル)をどれくらい表せるかで評価



PCA後の次元数

累積寄与率

1次元: 64.20%

2次元: 95.13%

3次元: 99.78%

4次元: 99.92%

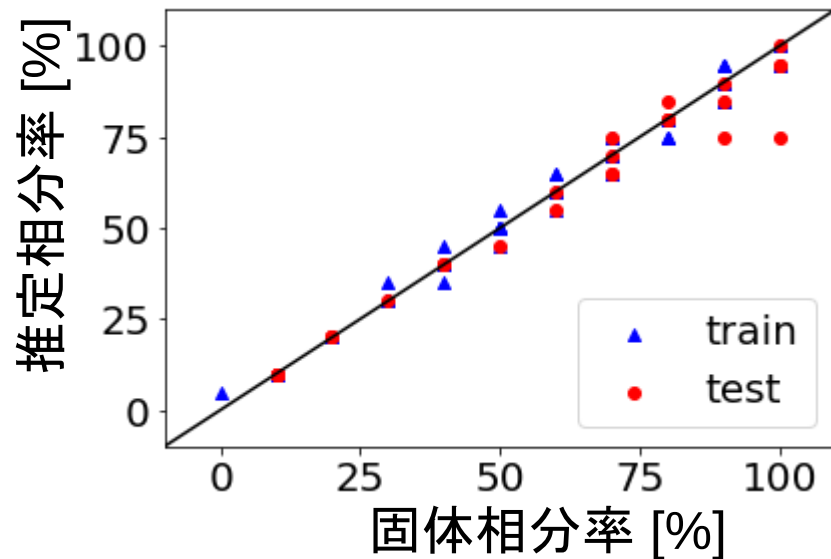
5次元: 99.98%

主成分分析を用いてスペクトルを3次元まで削減しても元データの99%を表現できる。

教師有り機械学習の訓練データ数と解析精度の関係

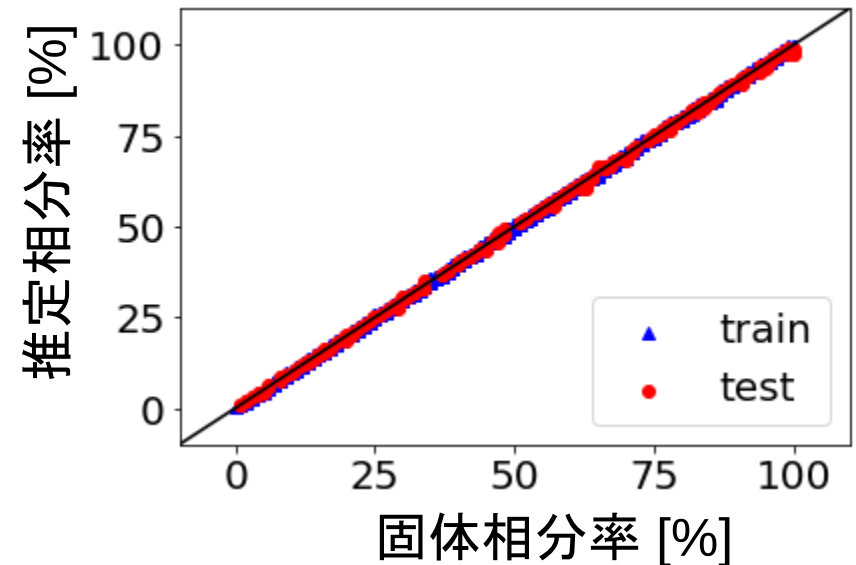
PCAで4次元にしたデータセット($\sigma=0\%$)をK近傍法(KNN)を用いて解析

訓練:テスト = 140:31



平均2乗誤差(RMSE): 5.889%

訓練:テスト = 1500:201

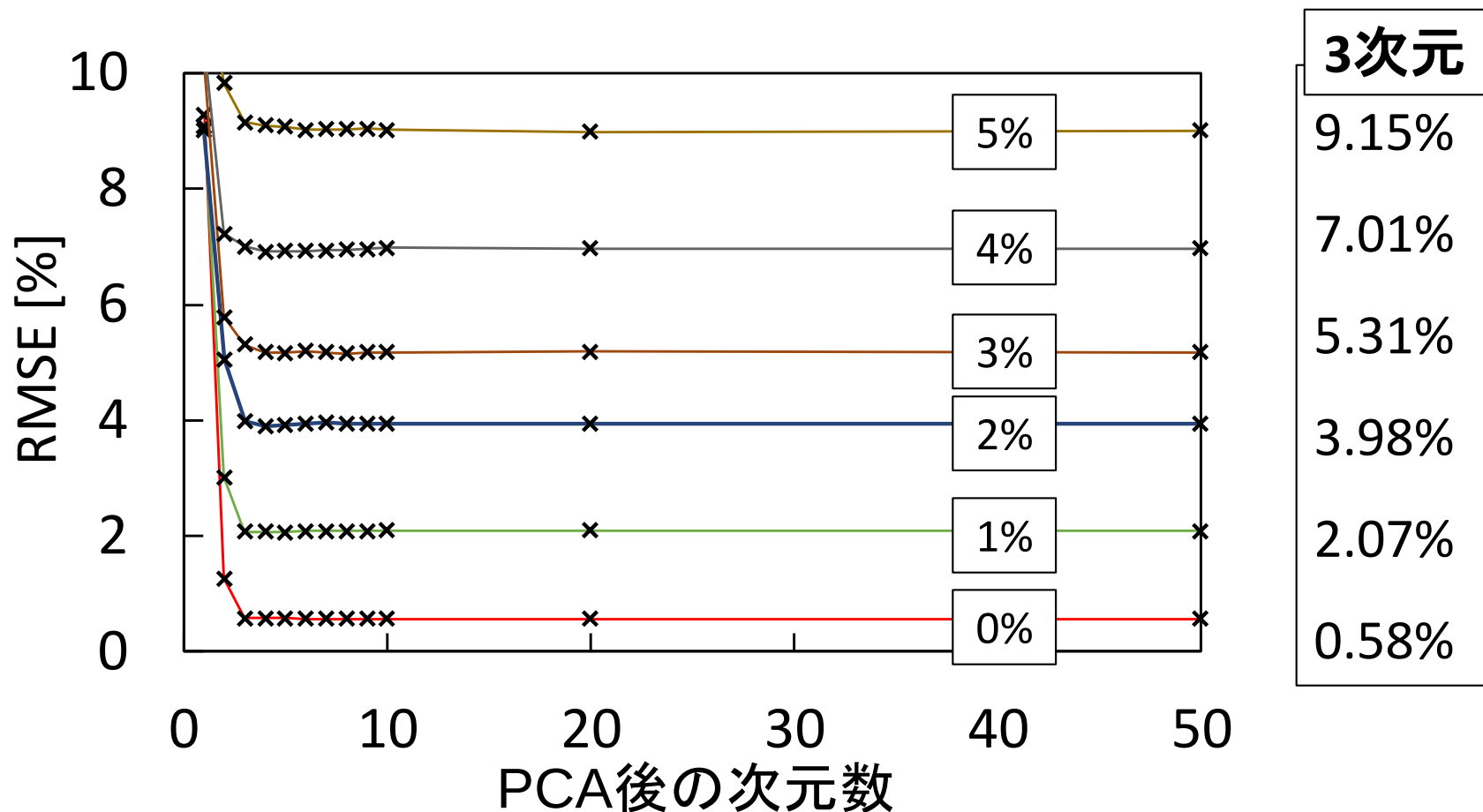


RMSE: 0.578%

機械学習に用いる訓練データを増やすことで解析精度が向上する。

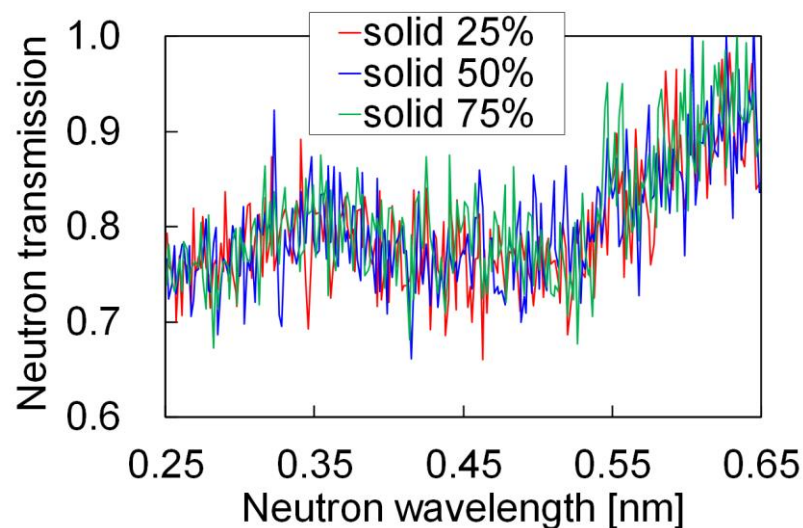
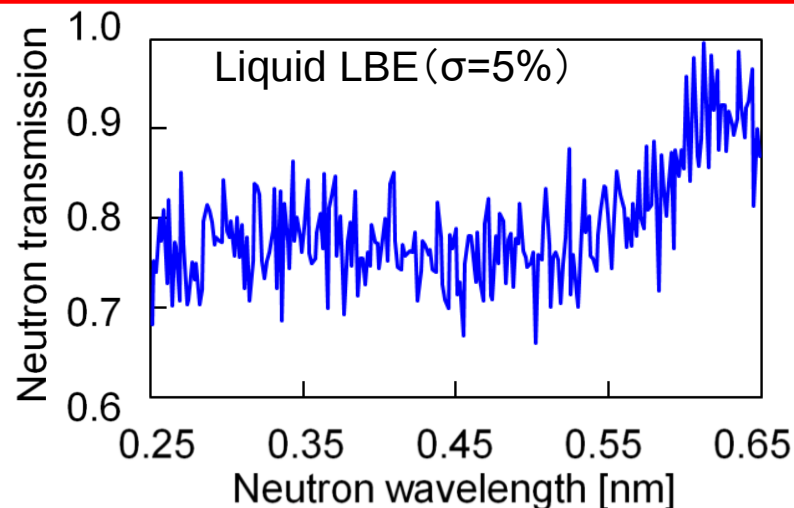
KNNによる解析結果(訓練データ $\sigma=0\%$)

統計誤差テストデータ(統計誤差 $\sigma=0\sim 5\%$)の解析結果

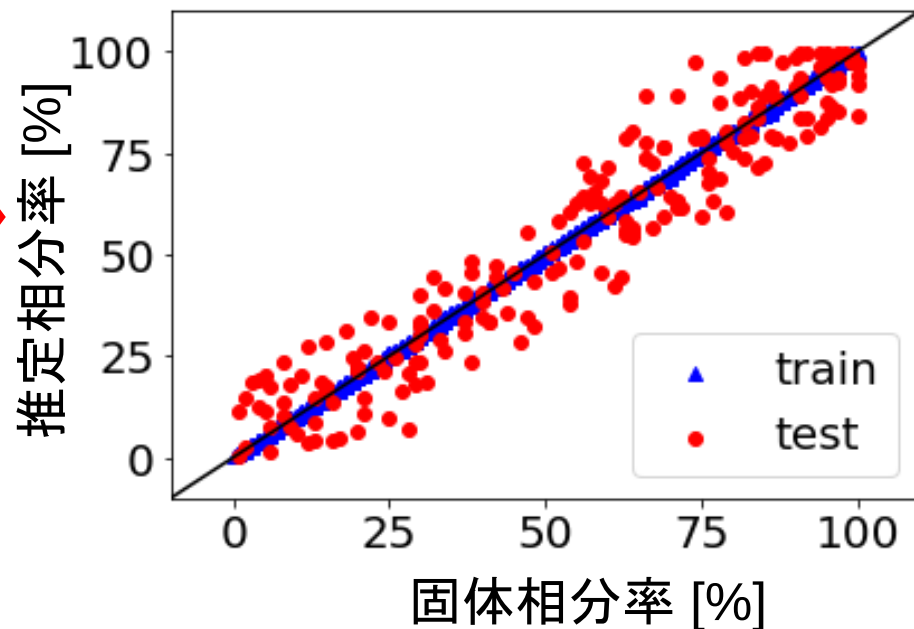


統計誤差($\sigma=5\%$)以内であれば、誤差が10%以内の解析結果が期待できる。

解析精度10%以内とは

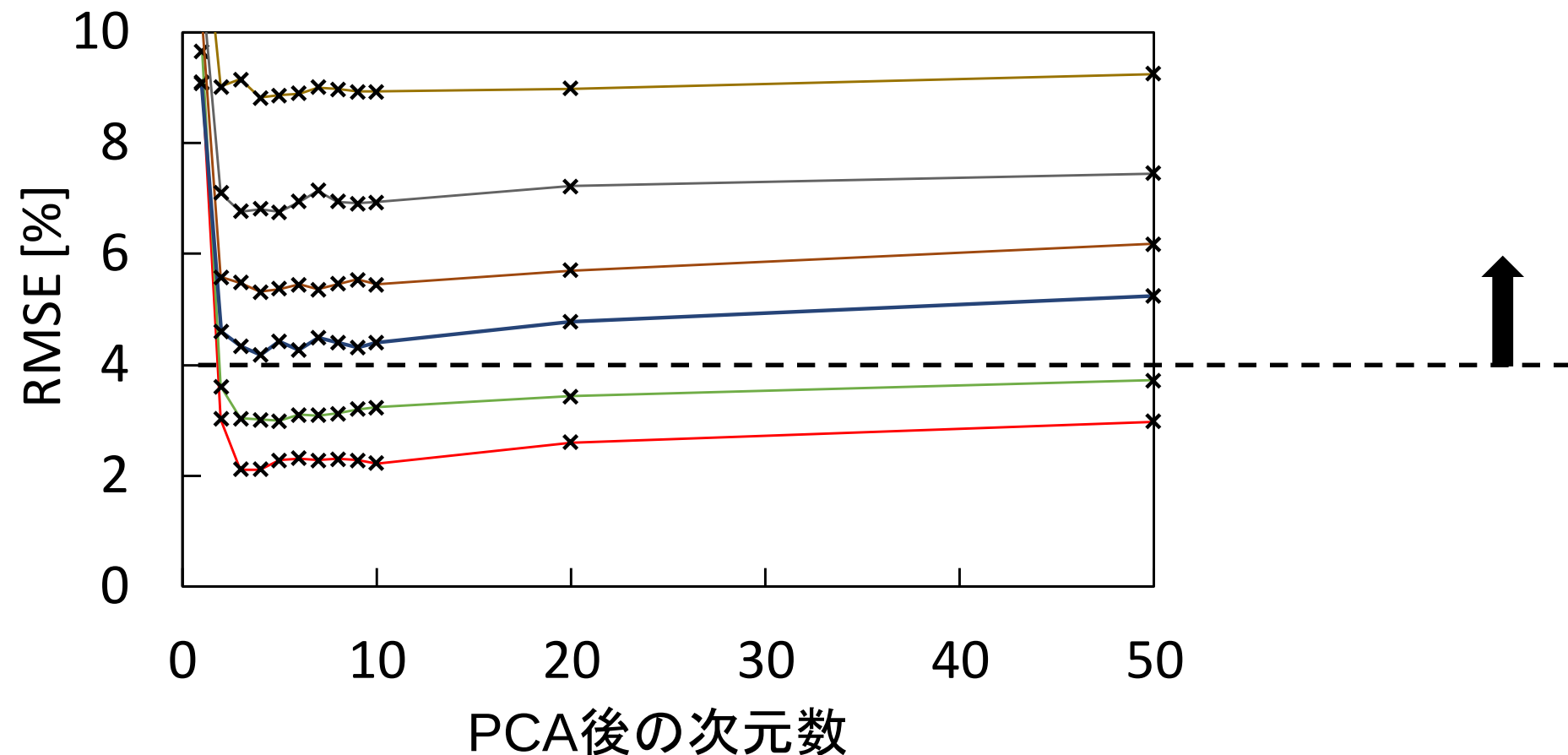


訓練データ($\sigma=0\%$):テストデータ($\sigma=5\%$)
= 1500:201



KNNによる解析結果(訓練データ $\sigma=2\%$)

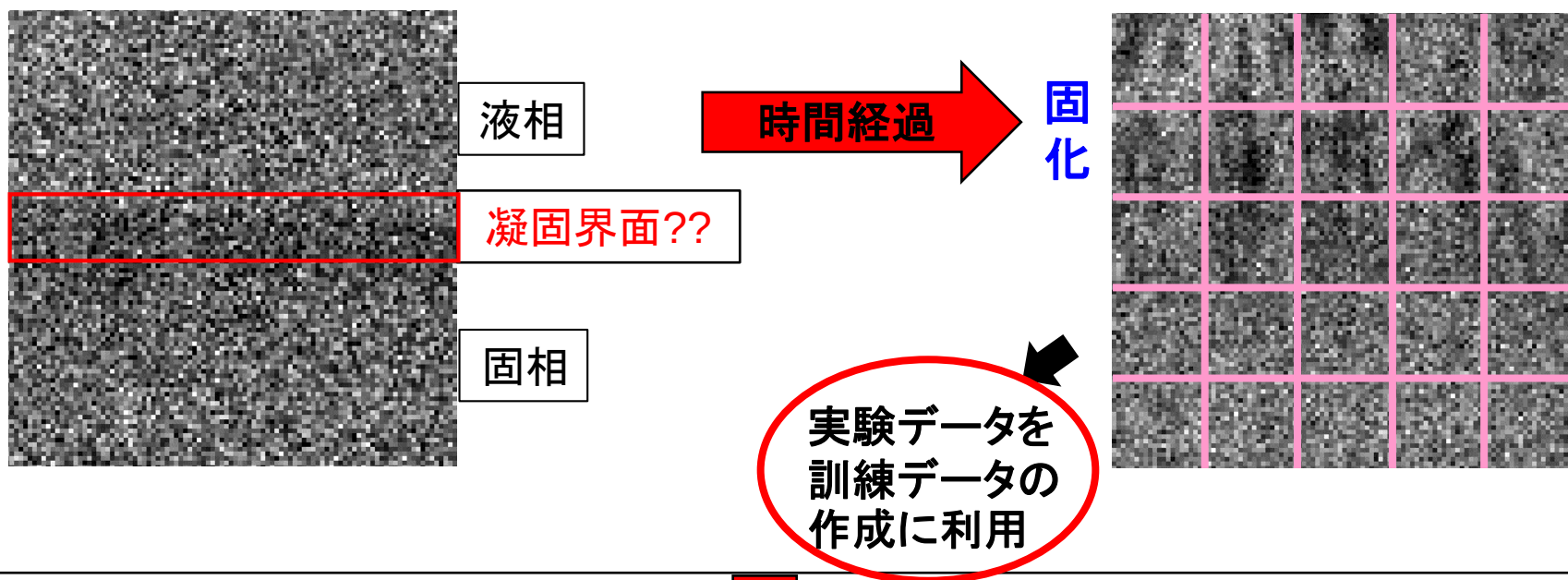
統計誤差テストデータ(統計誤差 $\sigma=0\sim5\%$)の解析結果



テストデータに統計誤差が含まれている場合では、統計誤差が含まれる訓練データを用いても精度があまり変わらない。

機械学習援用型相分率解析の流れの例

実験 凝固中のLBEの波長分析型中性子イメージング



機械学習法を援用して学習モデルを構築

固体・液体の相分率解析

全国の中性子施設連携、ネットワーク化に向けて：

中性子イメージングの普及には、それぞれの施設で同じ物を測定した時に相互に矛盾のない解釈結果が得られる必要がある。

施設毎のハードウェア由来の差(強度やビームコリメーション)は残らざるを得ないが、標準化された解析手順やエネルギースペクトルを考慮した解釈が必須。

<北大の研究テーマ>

- ・単純化・標準化により専門性を弱めたパルス中性子透過スペクトル解析法の開発
- ・中性子ビームラインの評価/保守にも使えるエネルギースペクトルの簡便な測定法