

令和3年度中性子イメージング専門研究会
2021年12月28日

機械学習援用中性子イメージングを用いた LBEの結晶組織構造解析法の開発

○大橋 亜矢霞, 佐藤 博隆, 加美山 隆

北海道大学 大学院工学院

伊藤 大介, 齊藤 泰司

京都大学 複合原子力科学研究所

波長分析型中性子ブラッグエッジイメージング

非破壊・非接触で位置ごとに対象物質の
結晶組織構造情報を含む中性子透過率スペクトル
を得ることができる

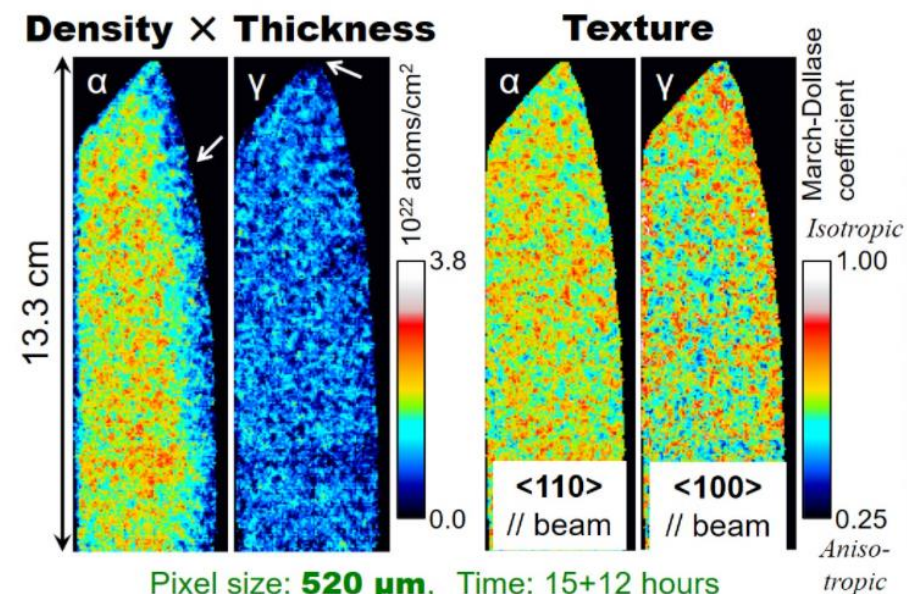
例 日本刀、溶接鋼板、リチウムイオンバッテリー etc.

課題

- ✓ 複雑な結晶組織や液相の構造解析が困難
- ✓ 1画素で得られる実験データの統計誤差が大きい

➡ 新しいアプローチでの解析が必要

包丁の投影原子数密度と集合組織発達度合い



先行研究: Pb-Bi共晶合金 (LBE) 凝固実験の固液相分率解析

統計誤差の大きい固相と液相を含むスペクトル

主成分分析



統計誤差に対するロバスト化
(次元削減)

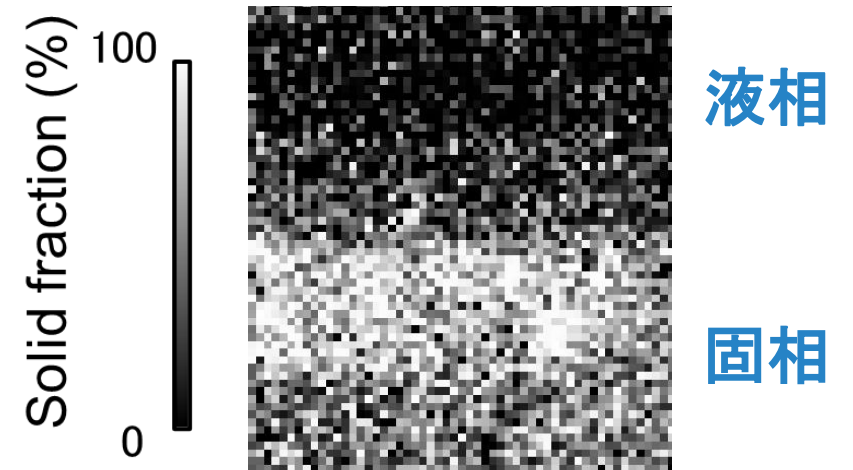
K最近傍法



固液相分率と次元削減され
たスペクトルの関係を学習

固液相分率イメージング解析が実現

Pb-Bi共晶合金 (LBE)
凝固過程の固液相分率イメージング



H 50 mm × W 40 mm

複雑な結晶組織の中性子透過率スペクトルの主成分分析

中性子透過率スペクトルの主成分分析

固液相分率だけでなく

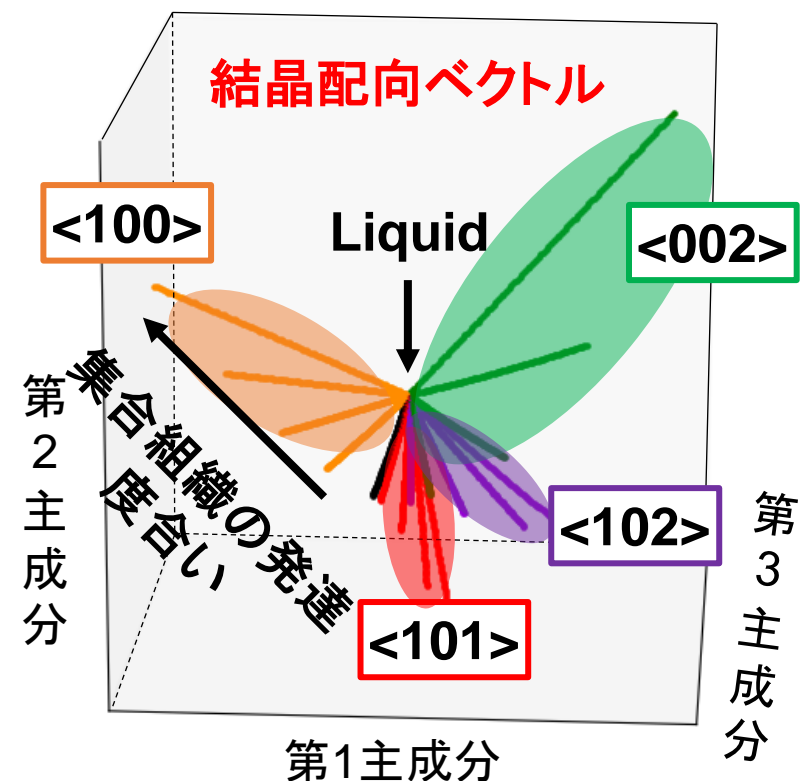
結晶配向ベクトルや集合組織の発達

度合いも識別できる



複雑な結晶組織の構造解析に向けて
機械学習を援用できないか

集合組織の違いによるスペクトル
主成分分析結果の変化



研究目的

主成分分析を援用した**複雑な結晶組織を構造解析する手法**の開発

発表内容

- ✓ 機械学習を用いたLBEの中性子透過率スペクトル処理
 1. 主成分分析を利用したバックグラウンド成分の除外
 2. クラスタリング分析による画素ごとのスペクトルの分類
- ✓ 処理されたスペクトルのRITSを用いた結晶組織構造解析の実現



①機械学習を用いたLBEの中性子透過率スペクトル処理

Pb-Bi共晶合金 (LBE) について

β相とγ相で構成される共晶型の合金

- ✓ 加速器駆動未臨界炉の核破砕ターゲット兼冷却材への利用が期待
- ✓ 凝固や結晶組織に関する研究が多く行われている

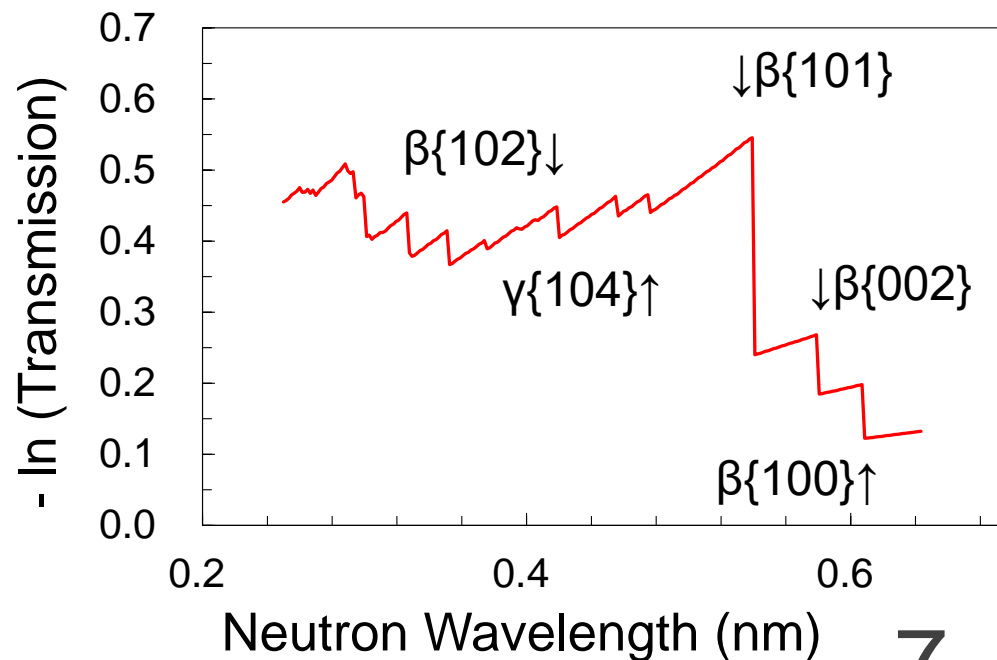
ブラッグエッジ解析の困難な点

- ✓ 二相かつ対称性が低い結晶構造
- ✓ 凝固組織では**集合組織や結晶配向ベクトルが複雑に変化**
- ✓ 異なる組織状態が**入り乱れて存在**

LBEの基本情報

鉛:ビスマス	44.5 : 55.5 (%)
β相結晶構造	六方最密
γ相結晶構造	菱面体晶
密度	10.5 g/cm ³
融点	124°C

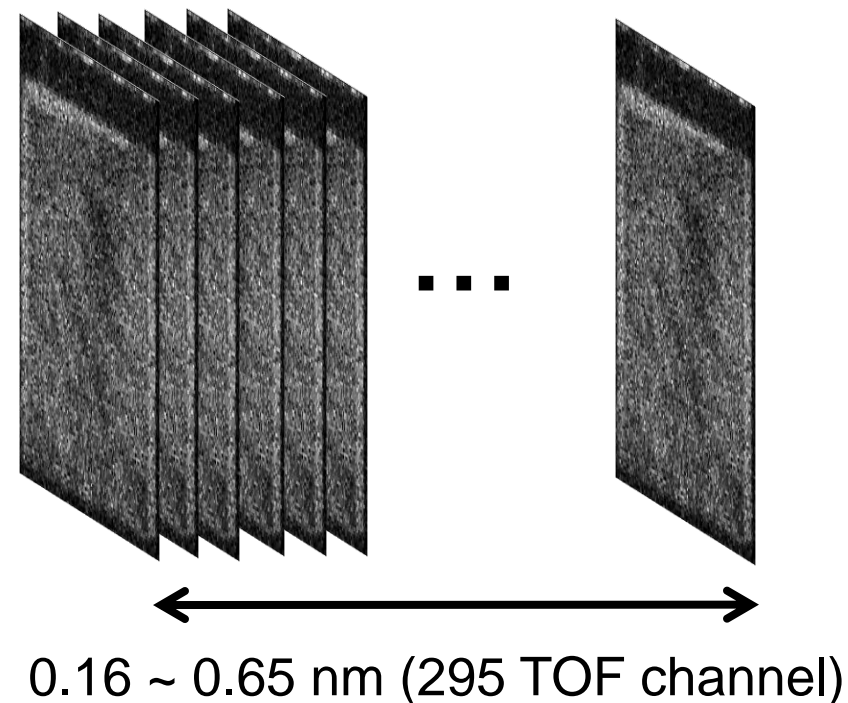
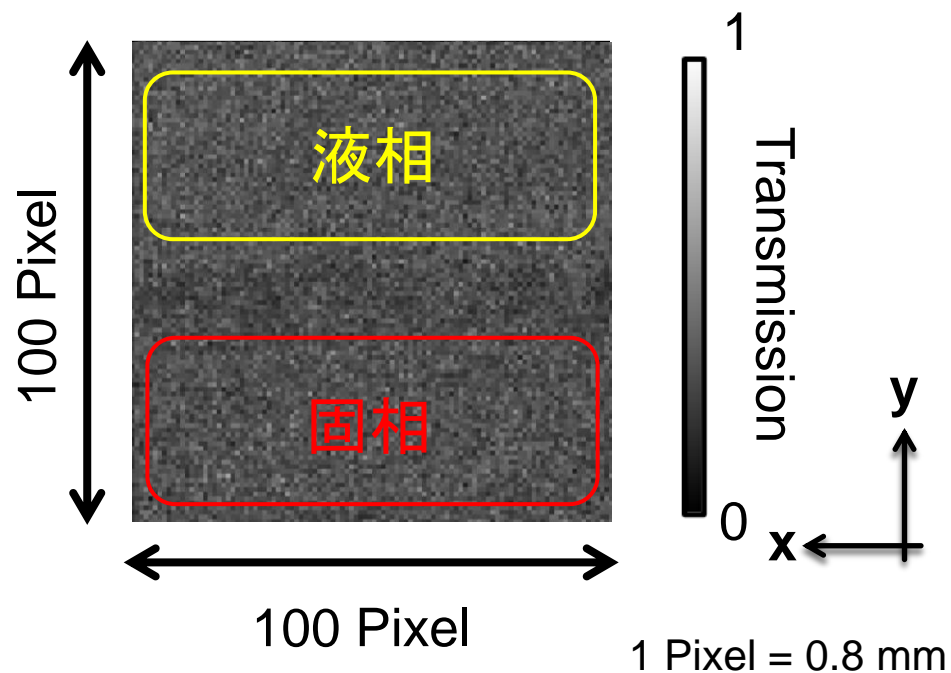
LBEのシミュレーションスペクトル



J-PARC RADEN におけるLBEの1次元凝固実験

LBEがy軸方向に凝固していく過程を30分ごとに測定

波長 0.54 nm 付近の透過率画像



全凝固後のLBE: 縦100×横100ピクセル, 10000スペクトルを解析

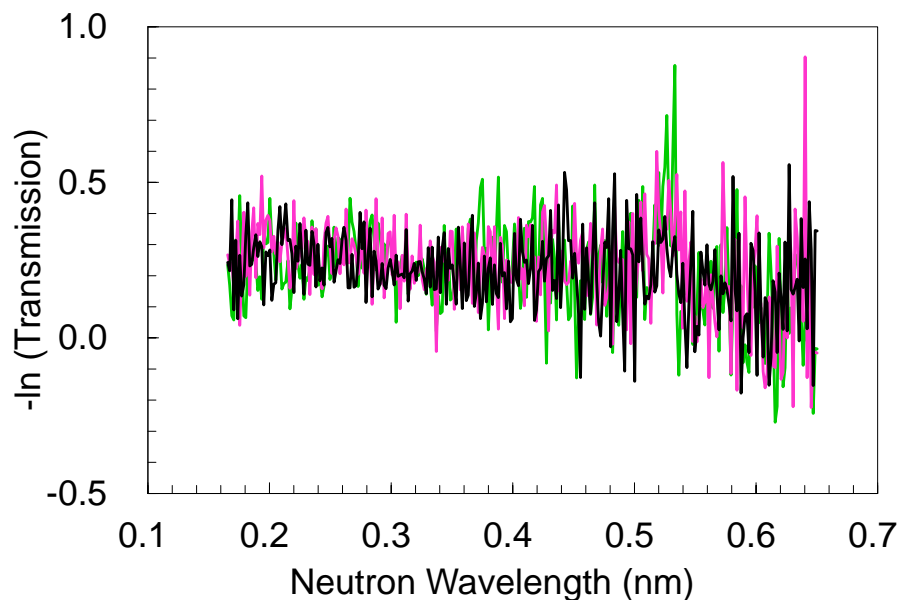
機械学習の適用① : LBEスペクトルの主成分分析

主成分分析 (Principal Component Analysis; PCA)

教師なし機械学習の代表的な手法の1つ。多変量データの次元削減などに使用される。

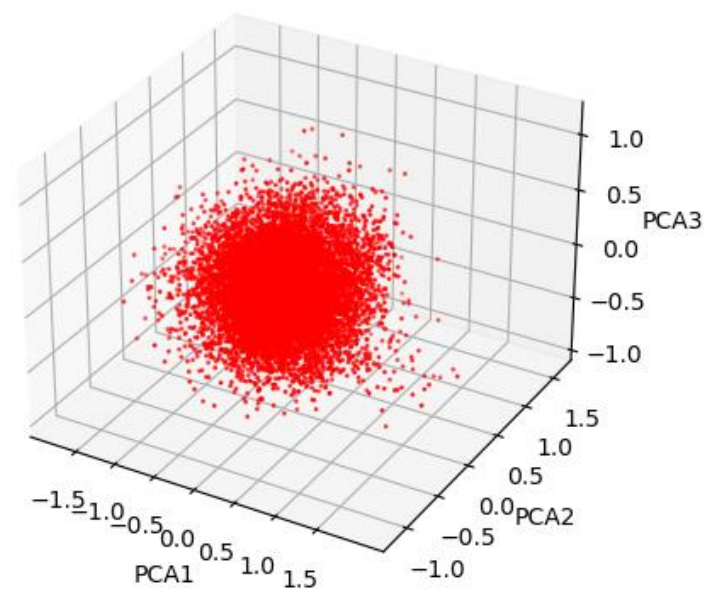
LBEのスペクトルを次元削減 ➡ 統計誤差に対して**ロバスト化**

LBE実験データのある三画素のスペクトル



全凝固後のLBE10000スペクトルのPCA結果

PCA
➡
295 ➡ 3次元

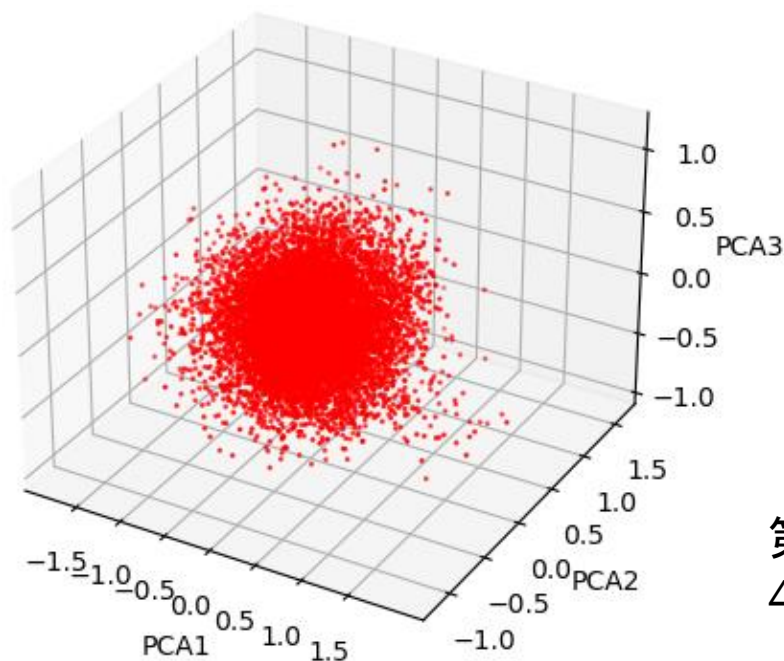


機械学習の適用② : クラスタリング分析

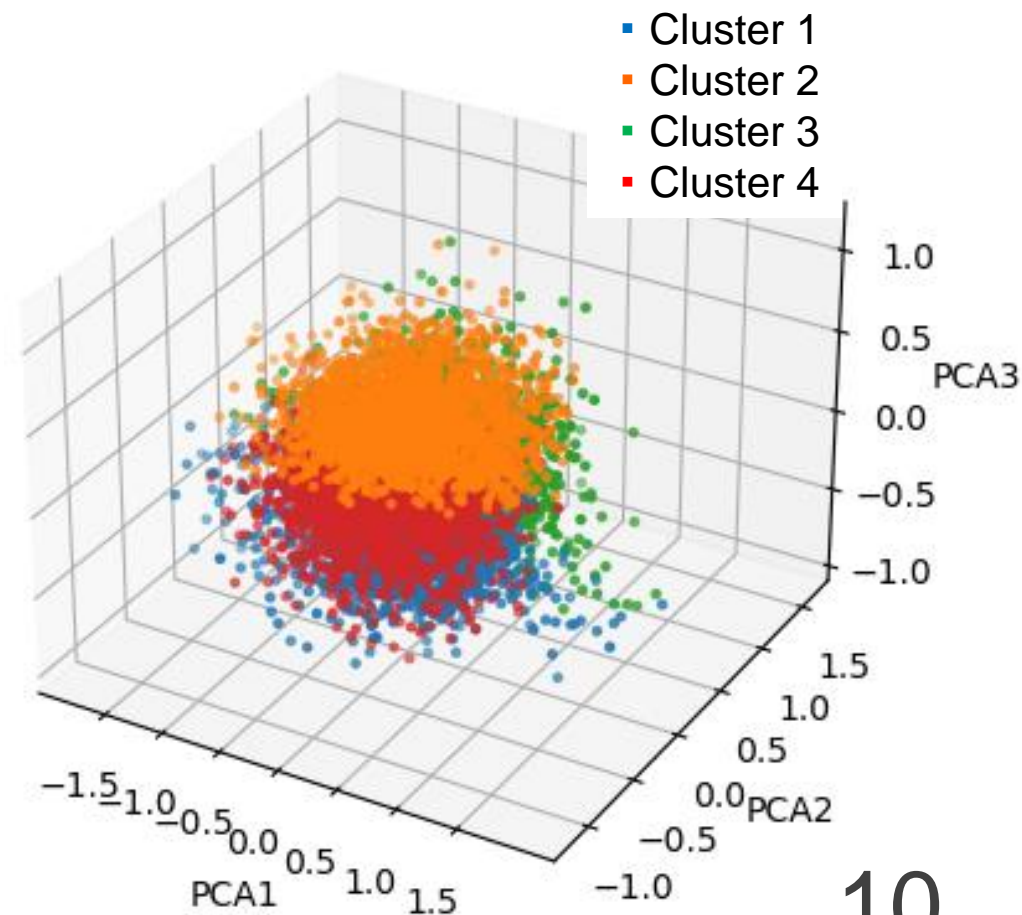
クラスタリング分析 (Clustering Analysis)

教師なし機械学習手法の1つ。データの類似度ごとにクラスター(集団)を作る。

本研究では非階層クラスタリング手法を適用

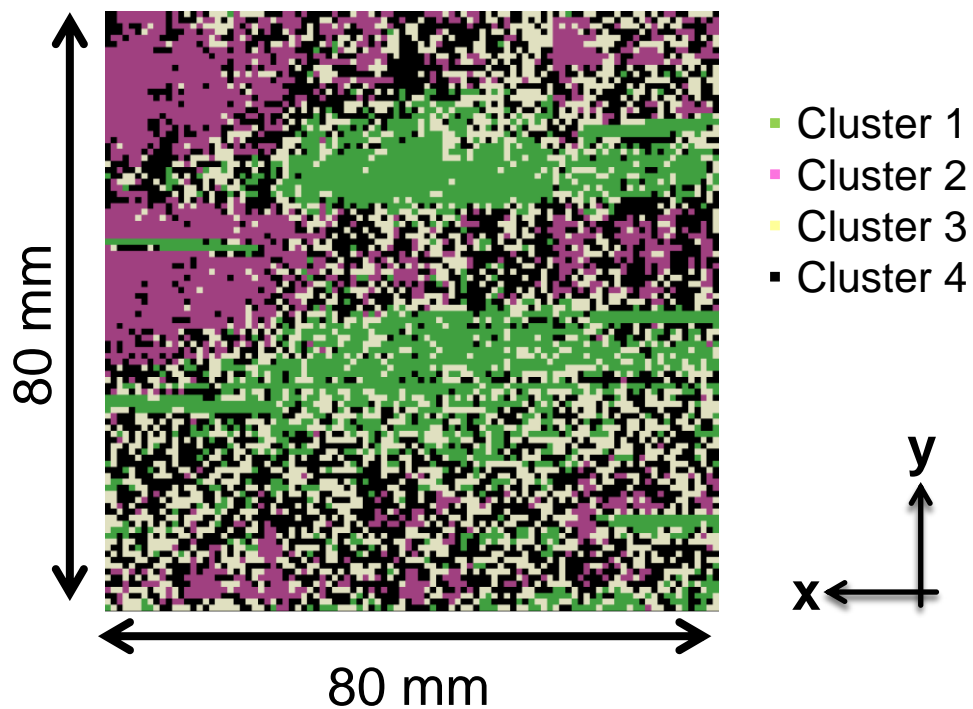


第1,2,3主成分
4つのクラスターに分類

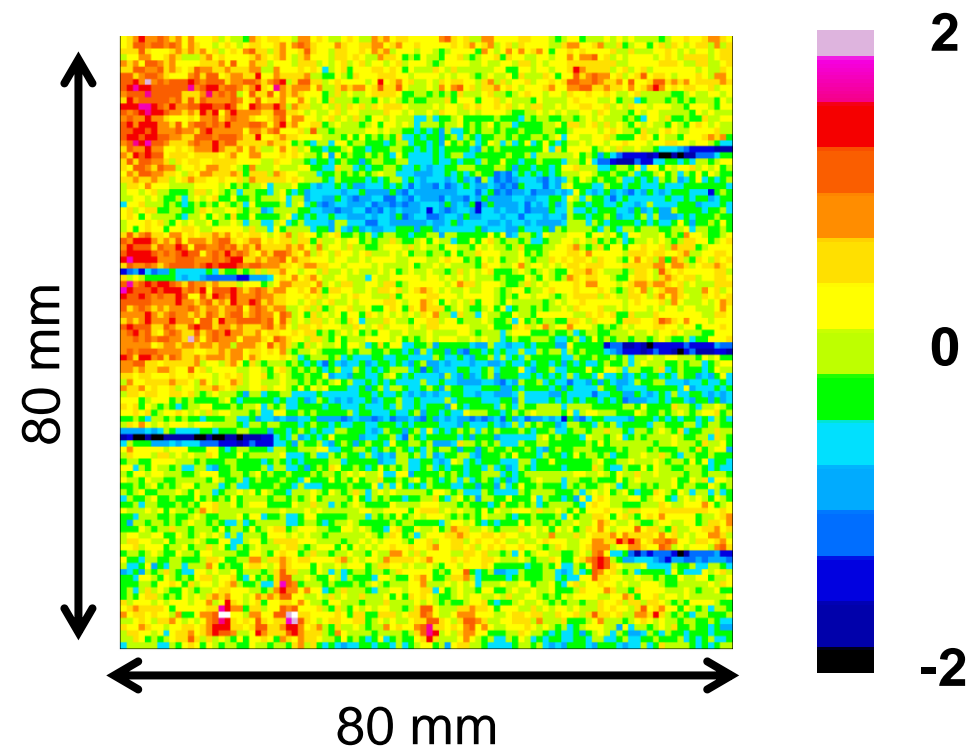


クラスタリング分析のイメージング結果

クラスタリング分析結果のイメージング



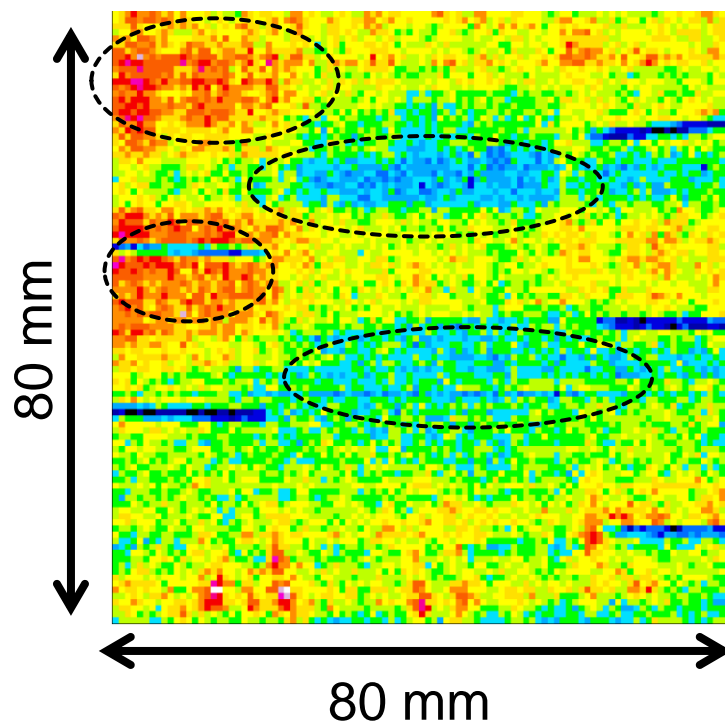
LBEスペクトルの主成分分析
第1主成分のイメージング



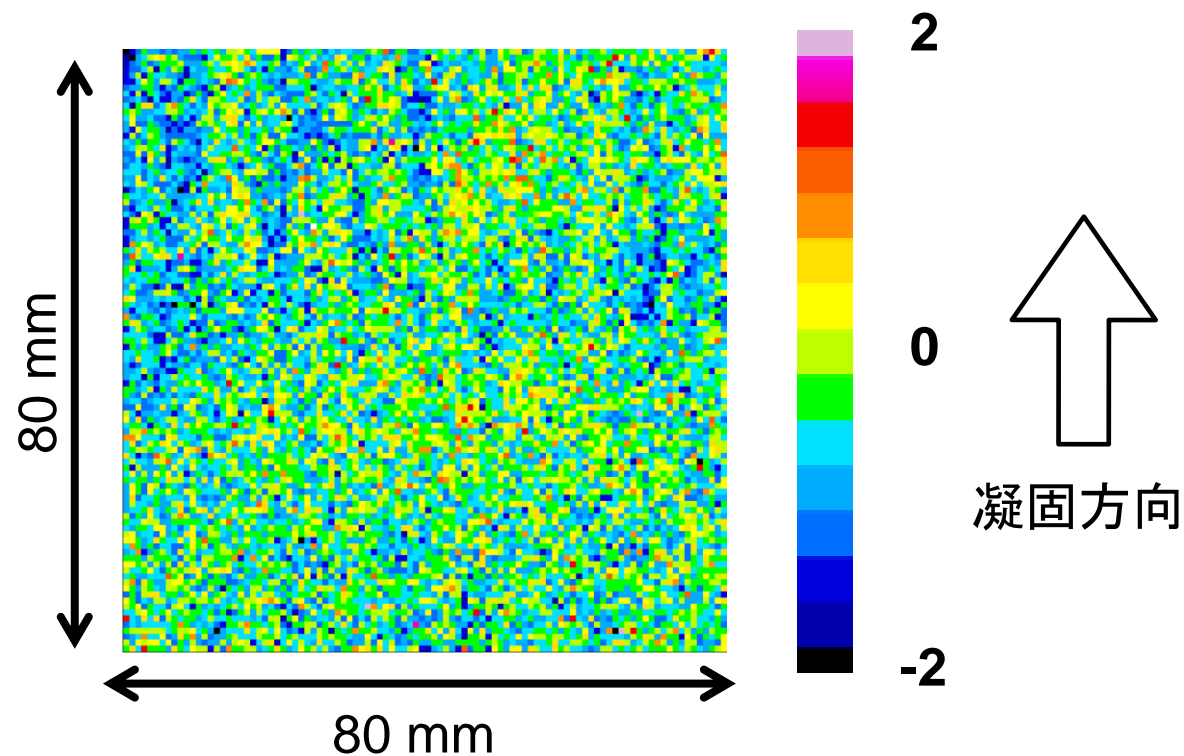
第一主成分(全波長域平均透過率に強く関係)の影響が強く現れた

主成分分析イメージング①

第1主成分のイメージング



第2主成分のイメージング

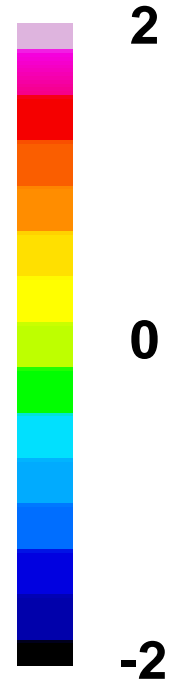
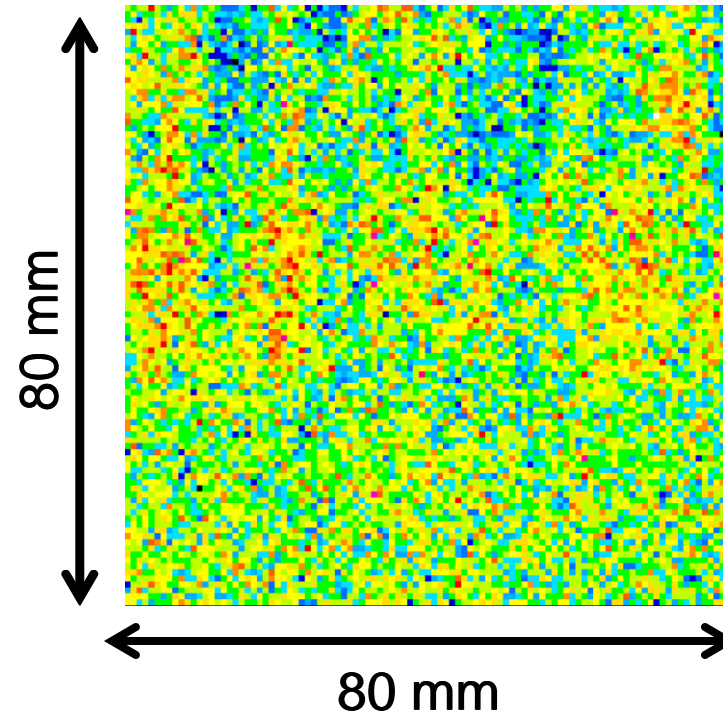
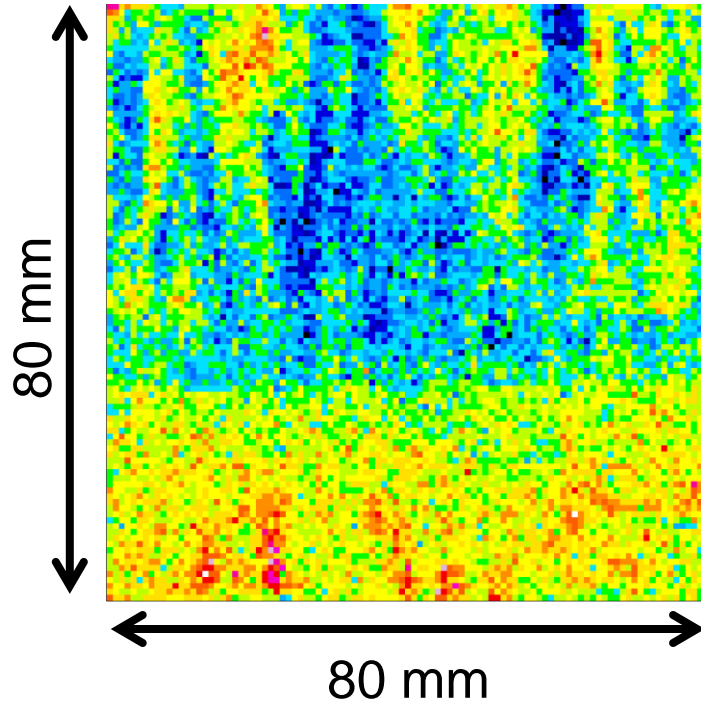
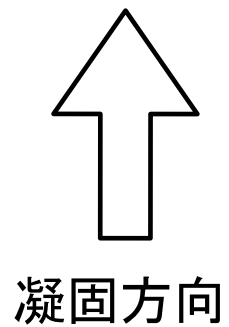


第1主成分にはガラスウールや熱電対(バックグラウンド)が現れている

主成分分析イメージング②

第3主成分のイメージング

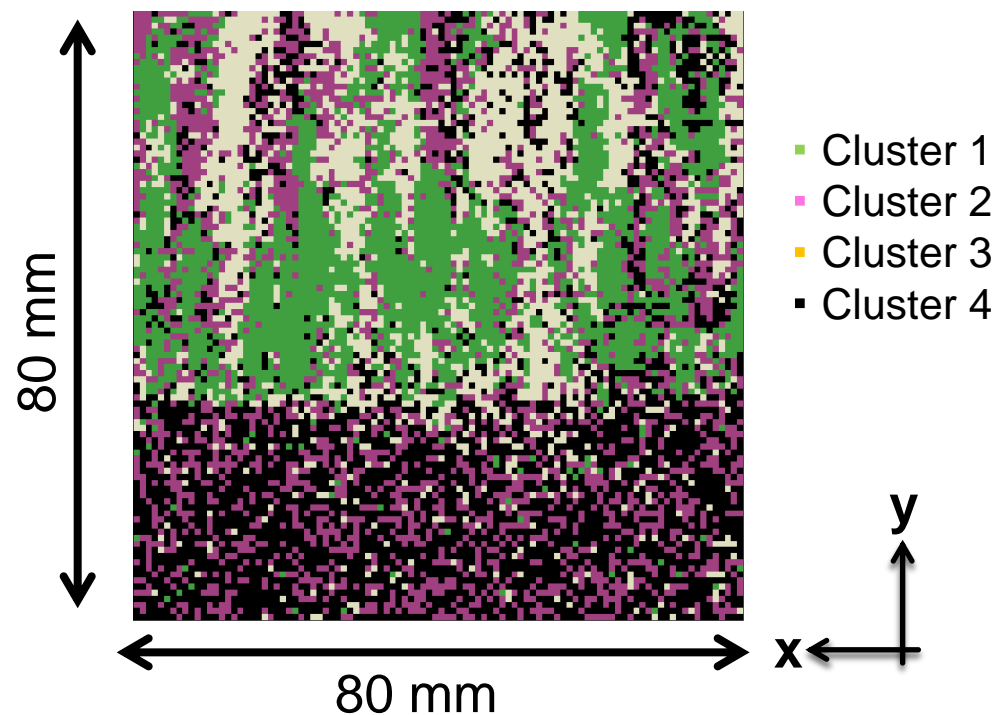
第4主成分のイメージング



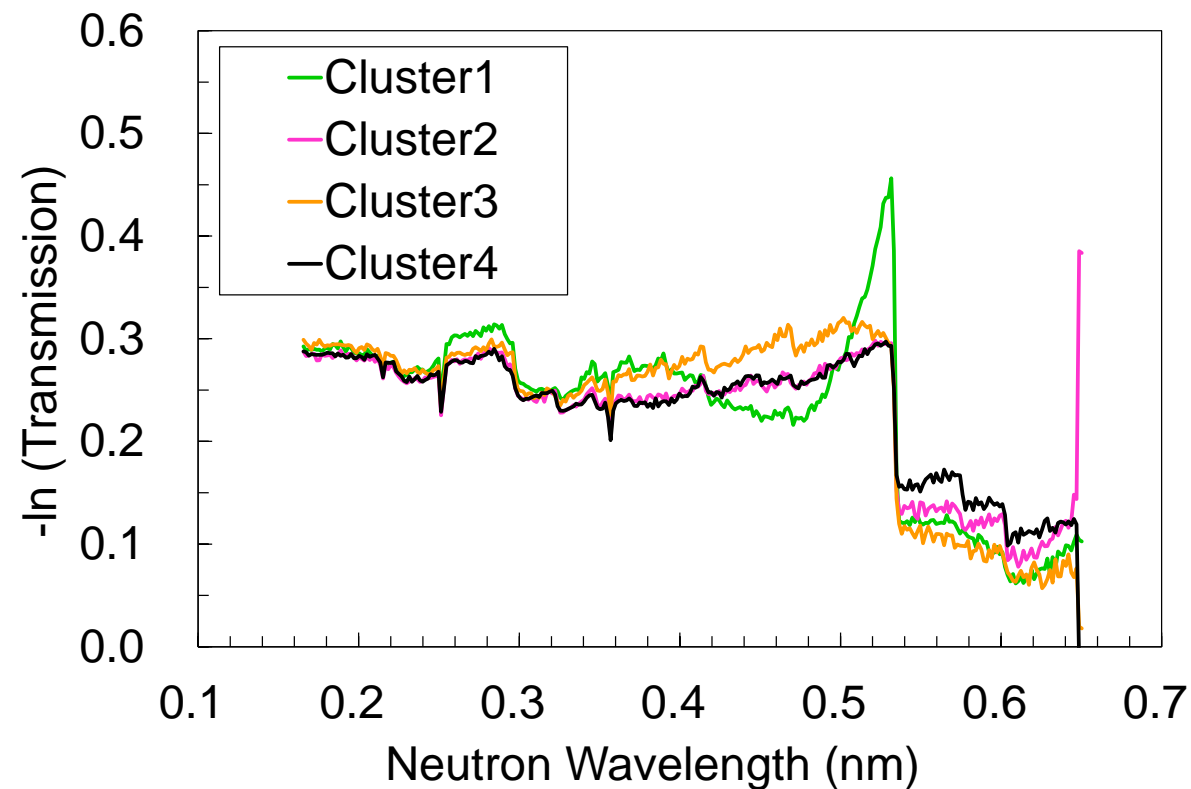
場所による集合組織の変化と考えられる特徴を確認

第1主成分を除いたクラスタリング分析結果

クラスタリング分析イメージング



各クラスターごとに積算平均したスペクトル



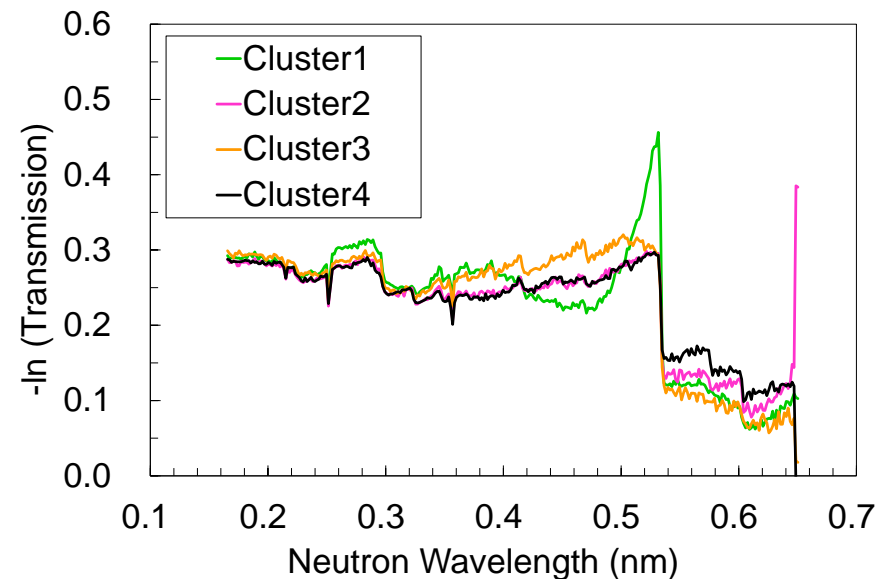
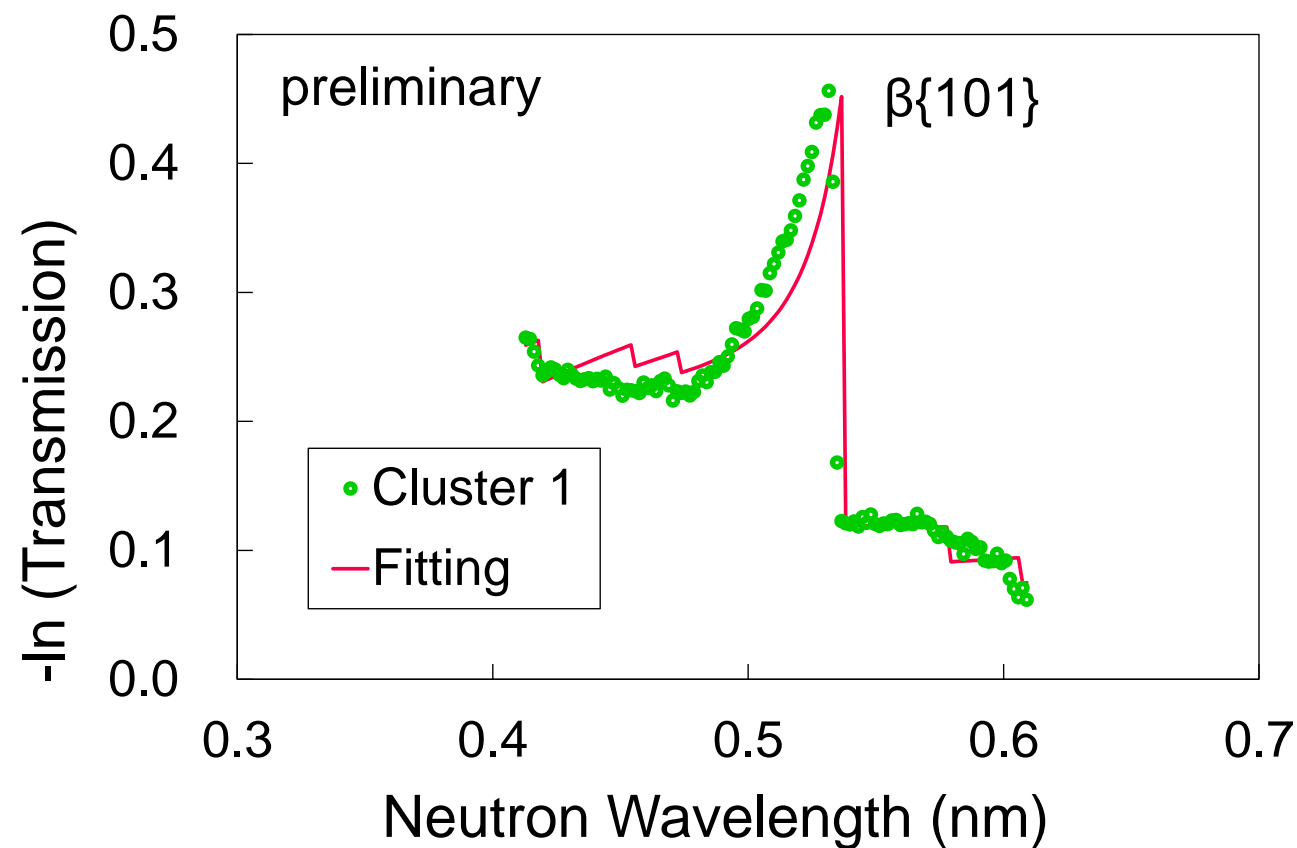
バックグラウンドの影響を除いてスペクトルの特徴ごとに分類成功



②処理されたスペクトルのRITSを用いた結晶組織構造解析

RITS：ブラッグエッジスペクトル用結晶組織解析コード

RITSでのフィッティング解析①

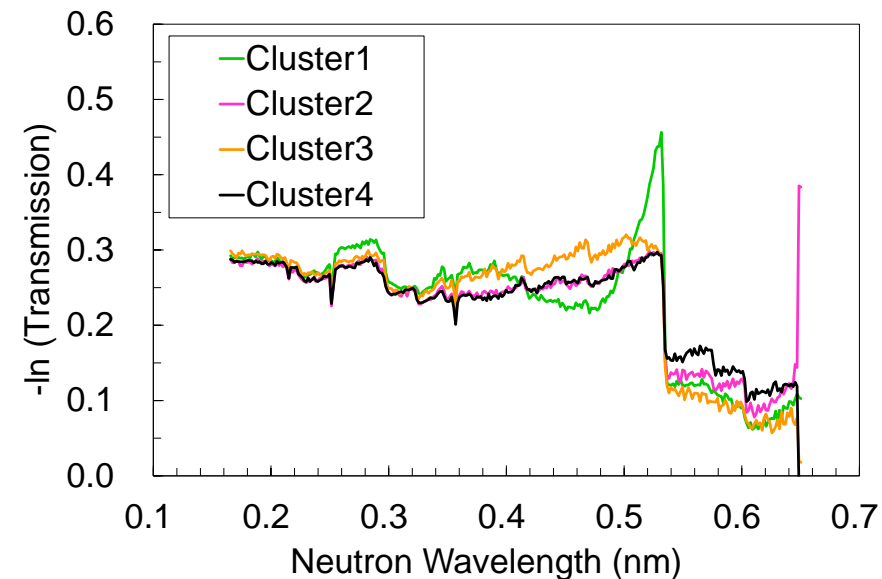
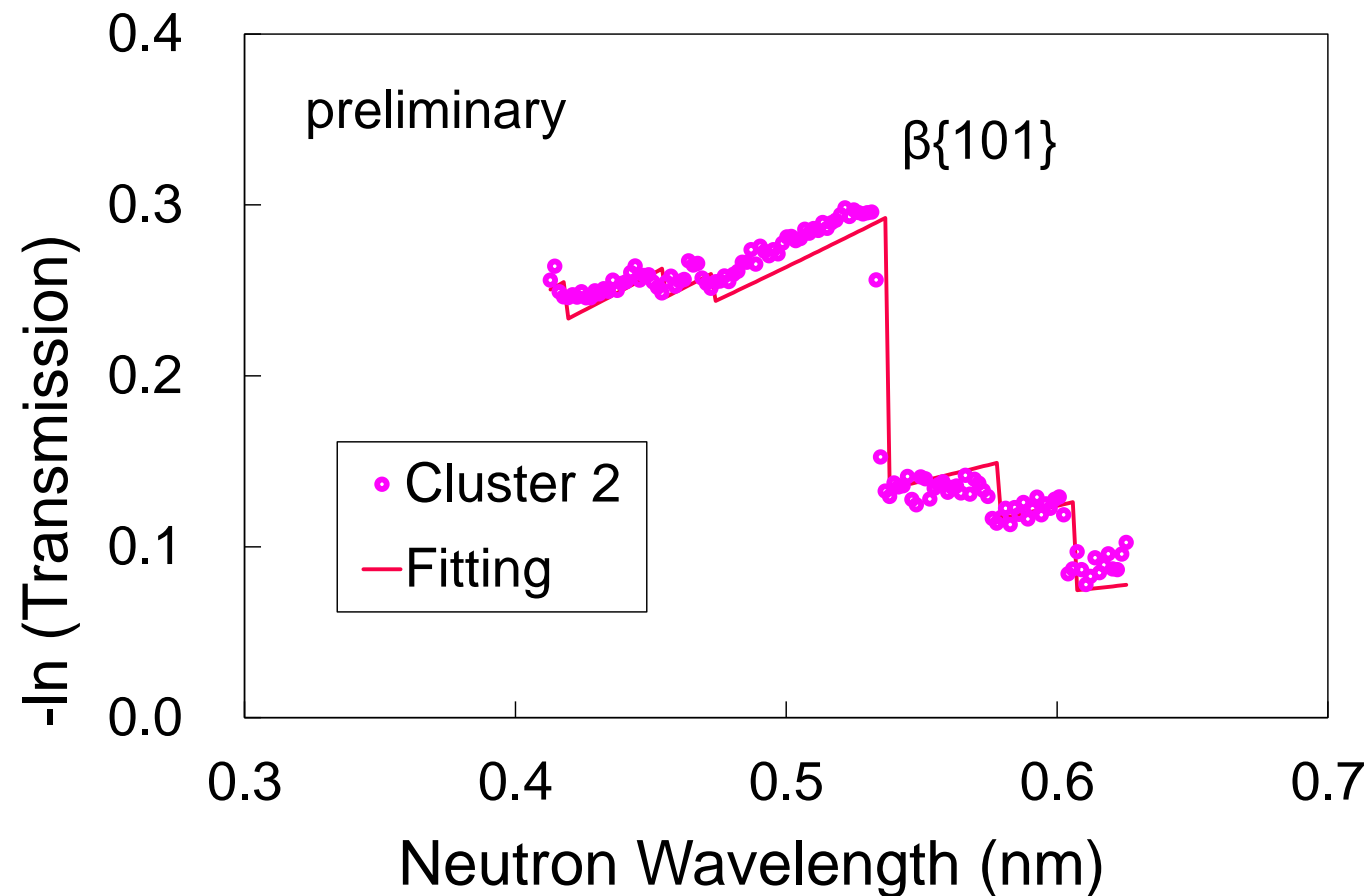


Cluster 1 のスペクトル

	β 相
選択配向ベクトル	$\langle 101 \rangle$
集合組織発達係数	0.44
結晶子サイズ(μm)	6.61

$\beta\langle 101 \rangle$ が入射ビーム方向に対して選択配向している集合組織が発達

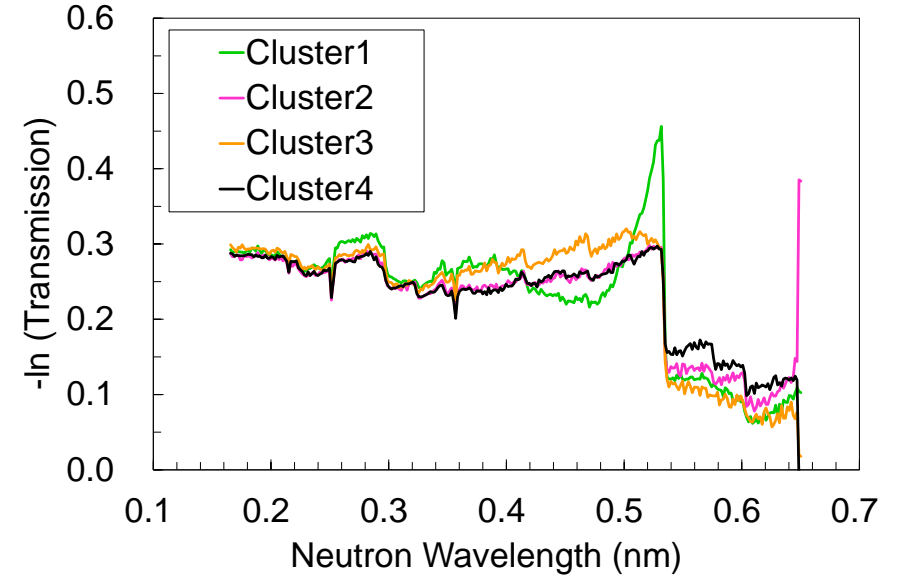
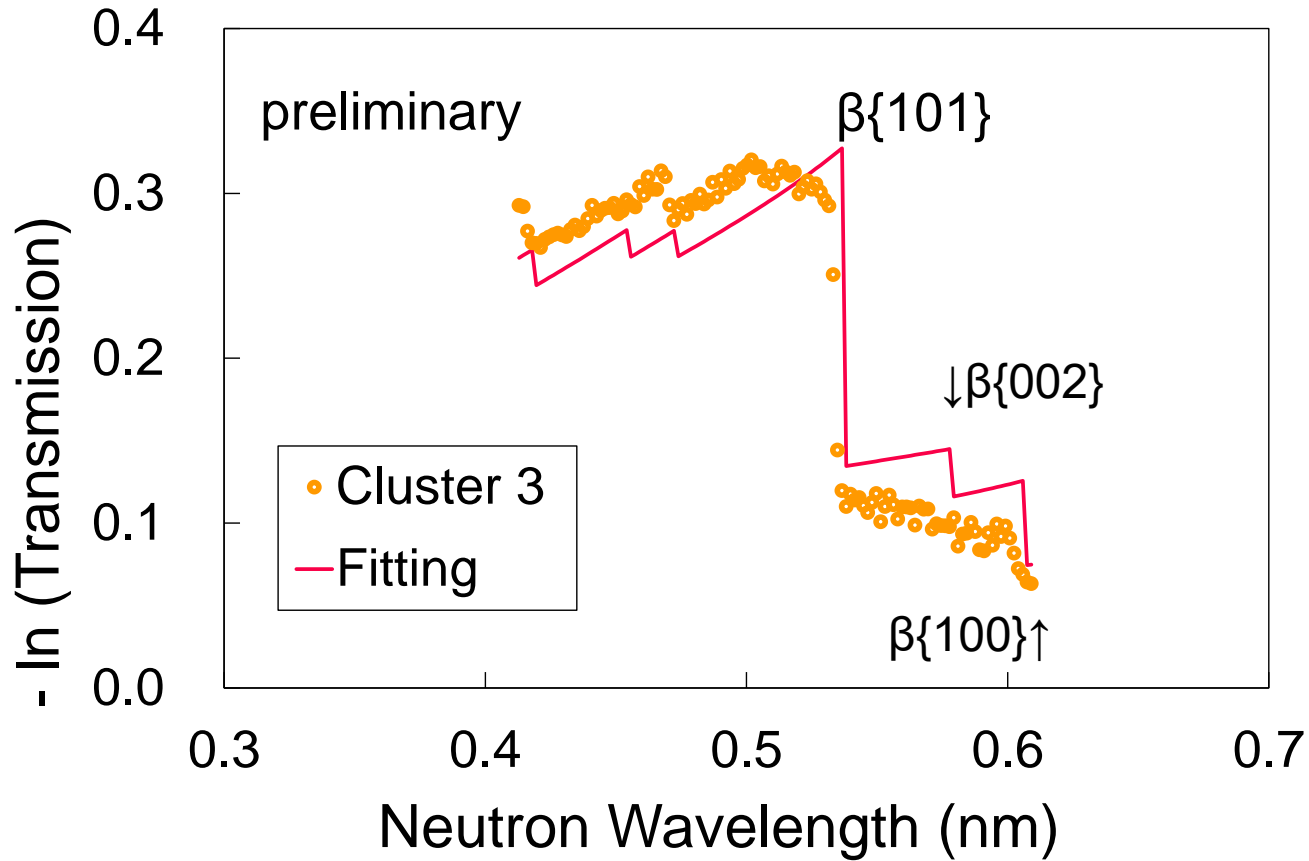
RITSでのフィッティング解析②



Cluster 2 のスペクトル

	β 相
選択配向ベクトル	$\langle 002 \rangle$
集合組織発達係数	1.10
結晶子サイズ(μm)	4.11

RITSでのフィッティング解析③

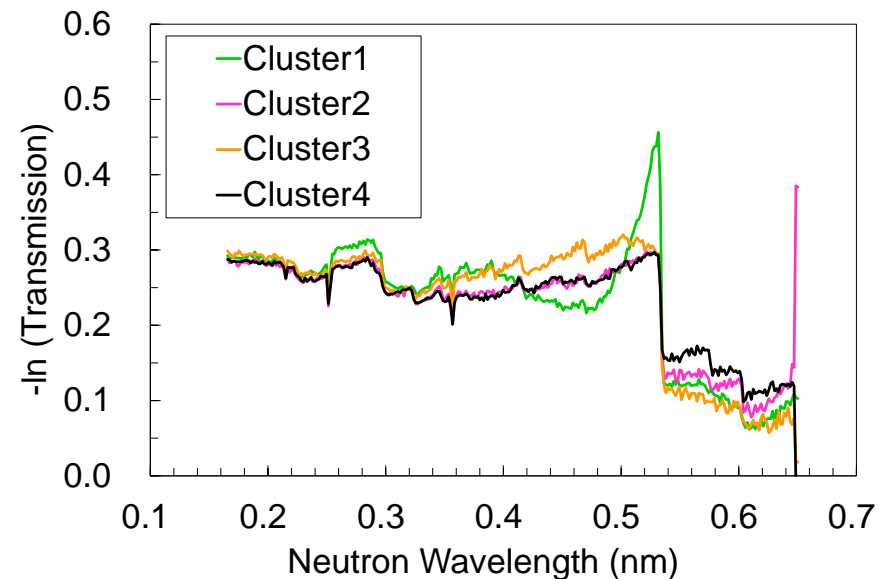
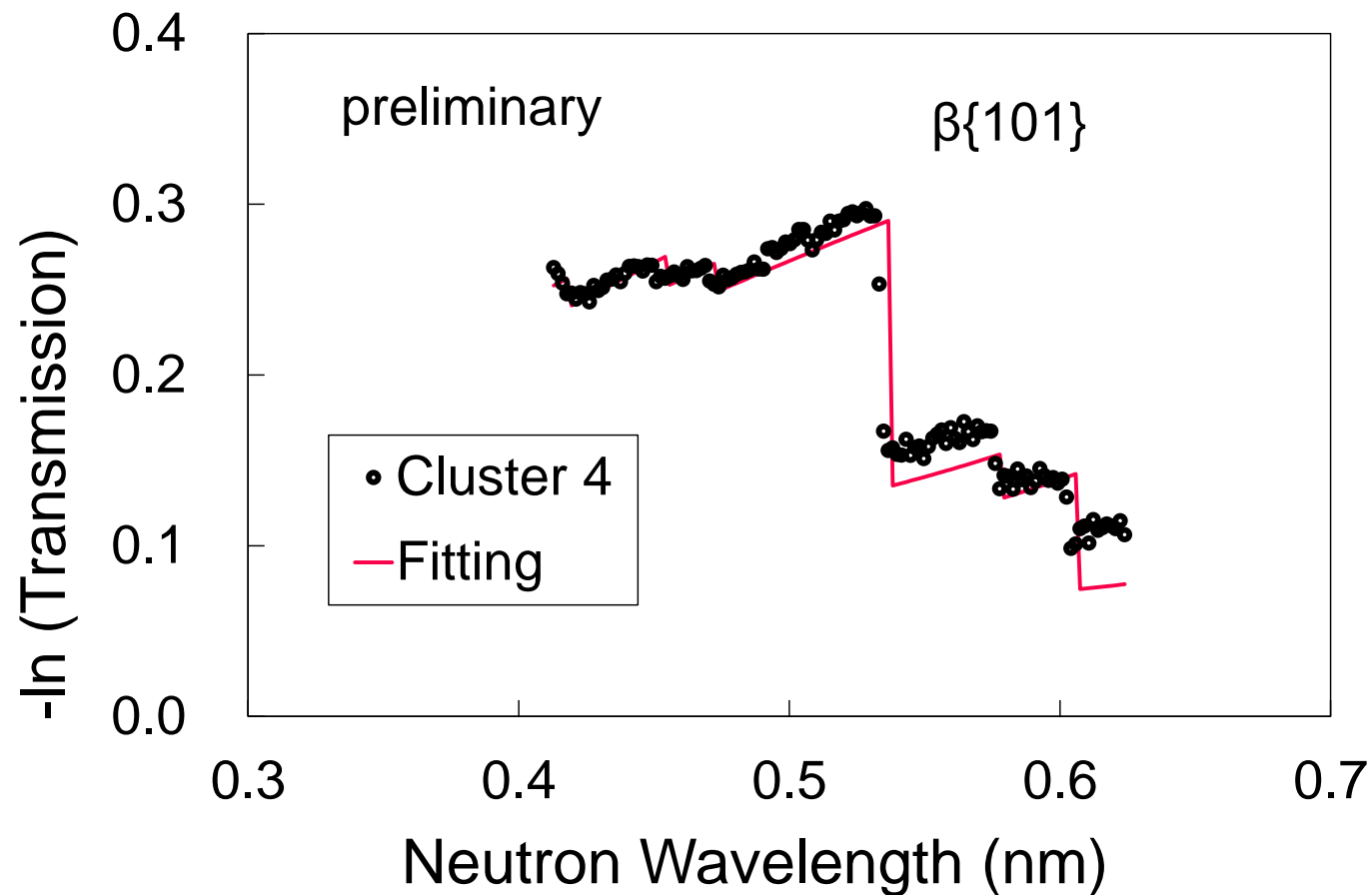


Cluster 3 のスペクトル

	β 相
選択配向ベクトル	$\langle 101 \rangle$
集合組織発達係数	1.50
結晶子サイズ(μm)	2.05

ブラッグエッジ形状からCluster1とは異なる配向ベクトルの集合組織が発達していると考えられる

RITSでのフィッティング解析④

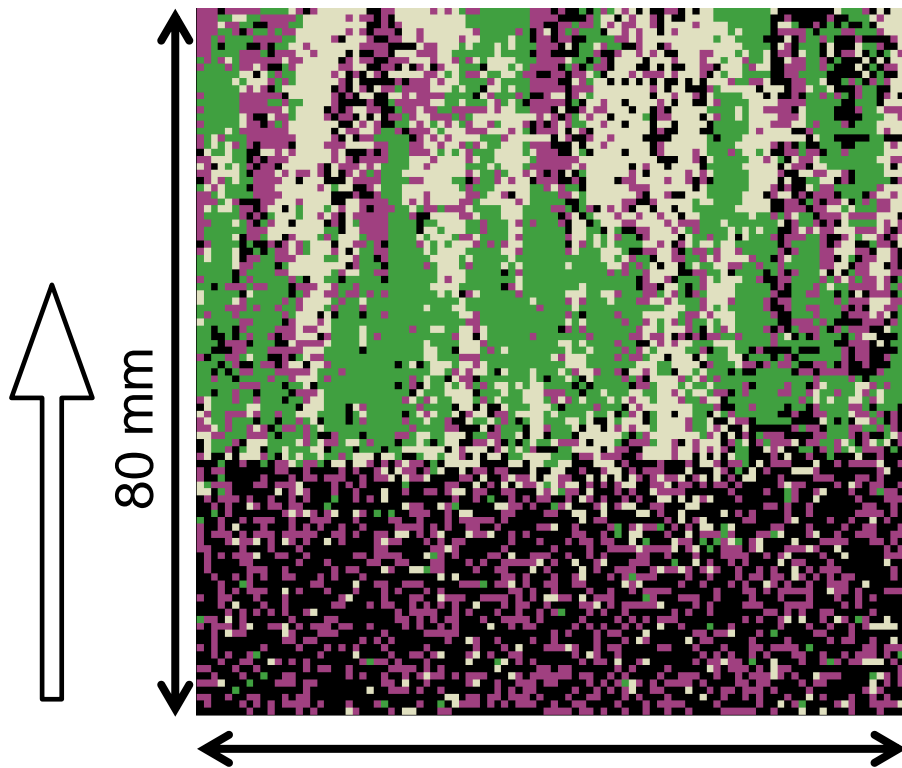


Cluster 4 のスペクトル

	β 相
選択配向ベクトル	$\langle 002 \rangle$
集合組織発達係数	1.27
結晶子サイズ(μm)	0.00

異なる集合組織状態を同定したイメージング

クラスタリング分析イメージング



RITSでのフィッティング解析結果

Cluster 1

$\beta<101>$ が入射ビーム方向に対して選択配向している
集合組織が存在

Cluster 3

Cluster1とは別の選択配向組織を持った**集合組織**が存在

異なる集合組織状態を同定した
イメージングに成功

- Cluster 1 ■ Cluster 3
- Cluster 2 ■ Cluster 4

まとめ

研究目的

主成分分析を援用した現状ではイメージング解析が難しい
複雑な結晶組織を構造解析する手法の開発

- ✓ PCAにおける**第一主成分の除外**
 - ➡ バックグラウンドの除去、スペクトル形状(集合組織の情報)の強調
- ✓ **クラスタリング分析**によるスペクトルパターンの**分類・イメージング**
 - ➡ RITSを用いたスペクトルの**結晶組織構造解析**に持ち込めた