
Klassifizierung komplexer Gefüge mit maschinellern Lernen am Beispiel bainitischer Stähle



Dissertation

zur Erlangung des Grades
des Doktors der Ingenieurwissenschaften
der Naturwissenschaftlich-Technischen Fakultät
der Universität des Saarlandes

von
Martin Paul Müller

Saarbrücken

2023

Tag des Kolloquiums:	7. März 2024
Dekan:	Prof. Dr. Ludger Santen
Berichterstatter:	Prof. Dr.-Ing. Frank Mücklich Prof. Dr. mont. Christian Motz Prof. Dr. Alexander Hartmaier
Akad. Mitglied:	Dr. Michael Roland
Vorsitz:	Prof. Dr. Guido Kickelbick

Kurzfassung

Ziel der vorliegenden Arbeit ist eine objektive und reproduzierbare Klassifizierung bainitischer Gefüge in Zweiphasen- und Multiphasenstählen mit Methoden des maschinellen Lernens (ML). Aufgrund der Komplexität der bainitischen Gefüge stellt die Zuordnung der für das ML benötigten Grundwahrheit eine enorme Herausforderung dar. Zur Implementierung der ML-basierten Auswertungen wird daher ein ganzheitlicher, materialwissenschaftlich basierter Ansatz vorgeschlagen, der sich nicht lediglich auf ML-Algorithmen beschränkt, sondern auch alle Schritte hin zum Erhalt einer Gefügaufnahme berücksichtigt. In diesem Rahmen wird eine Methodik zur korrelativen Charakterisierung mittels Lichtmikroskopie (LM), Rasterelektronenmikroskopie (REM) und Elektronenrückstreubeugung (EBSD) entwickelt, die eine kombinierte Gefügequantifizierung aus Mikroskopaufnahmen und den EBSD-Daten erlaubt und darüber überhaupt erst die objektive und reproduzierbare Zuordnung der Grundwahrheit zulässt.

Dies ermöglicht die Klassifizierung bainitischer Unterklassen in REM-Aufnahmen von Zweiphasenstählen mit einer Genauigkeit von 83 % sowie in Multiphasenstählen die Segmentierung von lattenförmigem Bainit in LM- und REM-Aufnahmen mit 90 % Genauigkeit und die EBSD-basierte Klassifizierung von bainitischem und polygonalem Ferrit mit 96 % Genauigkeit.

Die entwickelten Ansätze und Methoden sind verallgemeinerbar und lassen sich sowohl auf andere Stahlgüten als auch auf andere Werkstoffklassen übertragen.

Abstract

The present work is aimed at developing an objective and reproducible classification of bainitic microstructures in two-phase and multiphase steels using machine learning (ML) methods. Due to the complexity of bainitic microstructures, assigning the ground truth required for ML is an enormous challenge. In order to implement the ML-based evaluations, a holistic material science-centered approach is therefore proposed, which is not limited to ML algorithms, but also considers all steps towards obtaining a microstructural image. In this context, a methodology for correlative characterization by means of optical microscopy (OM), scanning electron microscopy (SEM) and electron backscatter diffraction (EBSD) is developed which allows a combined microstructural quantification from microscopic images and EBSD data, thus enabling the objective and reproducible assignment of the ground truth in the first place.

Using this approach, accuracies of 83 % in the classification of bainitic subclasses in SEM images of two-phase steels are achieved. In multiphase steels, the segmentation of lath-shaped bainite in LOM and SEM images was accurate in 90 % of the cases and the EBSD-based classification of bainitic and polygonal ferrite was demonstrated with an accuracy of 96 %.

The approaches and methods developed in the scope of this work are generalizable and can be applied to other steel grades as well as to other material classes.

Inhaltsverzeichnis

Danksagung.....	vii
Abkürzungsverzeichnis.....	viii
1 Einleitung und Motivation	1
2 Grundlagen und Stand der Technik.....	4
2.1 Stahl und seine Gefügebestandteile	4
2.1.1 Klassifizierungsschemata Stahl und Bainit.....	12
2.2 Gefügecharakterisierung & -quantifizierung	17
2.2.1 Kontrastierung.....	18
2.2.2 Korrelative Mikroskopie	19
2.2.3 Segmentierung.....	22
2.2.4 Methoden der Merkmals-Extraktion.....	23
2.3 Künstliche Intelligenz & Maschinelles Lernen.....	27
2.3.1 Überwachtes maschinelles Lernen.....	29
2.3.2 Unüberwachtes maschinelles Lernen.....	39
2.4 Künstliche Intelligenz in der Gefügeanalyse	40
3 Präzisierte Aufgabenstellung	49
4 Probenmaterial	51
4.1 Zweiphasenstähle	51
4.2 Multiphasenstähle	53
4.3 Probenauswahl und Herstellung von Referenzproben	54
4.4 Probenpräparation	57
4.5 Probenkontrastierung	57
4.6 Gefügecharakterisierung.....	58
5 Definition eines ganzheitlichen Ansatzes zur Anwendung von ML in MatWerk.....	60
6 Skalenübergreifende Gefügequantifizierung mittels korrelativer Mikroskopie.....	66
6.1 Experimenteller Ablauf.....	67
6.2 Qualitative Auswertung	69
6.3 Quantitative Auswertung	71
6.4 Zusammenfassung.....	76
7 Machine Learning Klassifizierung von Bainit in Zweiphasenstählen.....	79
7.1 Stand der Technik	79
7.2 Datensatz und Grundwahrheit.....	82
7.2.1 Existierender Datensatz.....	82
7.2.2 Zuordnung der Grundwahrheit.....	82

7.3	ML-basierte Klassifizierung.....	96
7.3.1	Datenvorverarbeitung.....	96
7.3.2	Klassifizierungsstrategie	98
7.3.3	Modell-Training.....	98
7.4	Ergebnisse und Diskussion	99
7.5	Demonstrator: Entwicklung von Bewertungsmetriken und Anwendung der ML-Klassifizierung in der industriellen Forschung	108
7.6	Zwischenfazit und Ausblick.....	116
8	Machine Learning Segmentierung von Multiphasenstählen.....	119
8.1	Datensätze und Grundwahrheiten	120
8.2	Segmentierung des lattenförmigen Bainits mittels Deep Learning.....	123
8.2.1	Deep Learning Methodik	123
8.2.2	Ergebnisse und Diskussion	125
8.2.3	Zwischenfazit	132
8.2.4	Ausblick	133
8.3	Unterscheidung von bainitischem und polygonalem Ferrit	134
8.3.1	Auswerteansätze und Modelltraining.....	134
8.3.2	Ergebnisse und Diskussion	138
8.3.3	Ausblick	142
8.3.4	Zwischenfazit	152
9	Zusammenfassung und Ausblick	154
10	Anhang.....	I
	Abbildungsverzeichnis.....	XXXVI
	Tabellenverzeichnis	XLII
	Literaturverzeichnis	XLIV

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich ganz herzlich bei allen Personen aus meinem beruflichen und persönlichen Umfeld bedanken, die mich im Laufe meines Promotionsverfahrens begleitet und unterstützt haben.

Mein ganz besonderer Dank gilt zunächst meinem Doktorvater Prof. Dr.-Ing. Frank Mücklich, nicht nur für die Möglichkeit, an seinem Institut arbeiten und promovieren zu dürfen, sondern auch für die vielseitige Förderung meiner persönlichen Entwicklung, und dass ich mich am Lehrstuhl und am MECS auch über mein Promotionsthema hinaus einbringen und mitgestalten konnte. Prof. Dr. Christian Motz möchte ich als meinem wissenschaftlichen Begleiter und für die Übernahme der Zweitkorrektur danken.

Ein ganz großes Dankeschön gilt meinem Betreuer am Lehrstuhl, Dr. -Ing. Dominik Britz, für die inhaltliche Ausrichtung meines Promotionsthemas, die intensiven Diskussionen und die konstruktive Zusammenarbeit. Ohne sein Feedback und seine Vorarbeiten zum Thema wäre die Arbeit in dieser Form nicht möglich gewesen. Außerdem konnten wir in den letzten Jahren gemeinsam mit Frank das Thema maschinelles Lernen in der Gefügeanalyse über die Institutsgrenzen hinweg vorantreiben. Ich bin sehr gespannt, was die Zukunft zu diesem Thema für uns bereithält.

Außerdem möchte ich allen Arbeitskollegen am Lehrstuhl und dem MECS danken, ganz besonders den Kollegen aus unserer „Stahlgruppe“. Bedanken möchte ich mich ebenfalls bei meinen Bachelor- und Masterarbeitern Laura Ulrich und Björn Bachmann.

Den Kollegen der Grobblechforschung bei Dillinger danke ich für die strategische Partnerschaft, in deren Rahmen diese Promotion entstanden ist. Insbesondere bedanken möchte ich mich bei Dr.-Ing. Thorsten Staudt für die vielen Diskussionen und die organisatorische und fachliche Unterstützung, sowie bei Jürgen Vogt, der mich regelmäßig bei der Probenvorbereitung unterstützt hat.

Ein Dank gilt auch den Kooperationspartnern, mit denen ich im Laufe meiner Promotion zusammengearbeitet habe: TA Instruments, der Gesellschaft zur Förderung angewandter Informatik e.V., dem Fraunhofer Institut für Werkstoffmechanik und der Carnegie Mellon University, Pittsburgh.

Dominik, Thorsten, Dr. -Ing. Christoph Pauly, Björn und Vera Müller danke ich für das kritische Korrekturlesen der Arbeit.

Zu guter Letzt bedanke ich bei meinen großartigen Eltern, die mir diesen Weg ermöglicht haben, meiner Familie, meinen Freunden und meiner Lebenspartnerin Margarita.

Abkürzungsverzeichnis

AI	Artificial Intelligence	KAM	Kernel Average Misorientation
ANN	Artificial Neural Network	KI	Künstliche Intelligenz
ASM	American Society for Materials	KWKG	Kleinwinkelkorngrenzen
BF	Bainitischer Ferrit	LBP	Local Binary Pattern
C	Kohlenstoff	LF	Lattenförmiger bainitischer Ferrit
CI	Confidence Index	LM	Lichtmikroskop
CMU	Carnegie Mellon University	M	Martensit
CNN	Convolutional Neural Network	M/A	Martensit-Austenit Bestandteil
DC	Debris of Cementite	Max	Maximum
DGM	Deutsche Gesellschaft für Materialkunde	MD	Median
DL	Deep Learning	Min	Minimum
DP	Degenerierter Perlit	ML	Maschinelles Lernen
DT	Decision Tree	MRMR	minimum redundancy maximum relevance
EBSD	Elektronenrückstreubeugung	MW	Mittelwert
EKD	Eisen-Kohlenstoff-Diagramm	OB	Oberer Bainit
EPMA	Elektronenstrahlmikroanalyse	P	Perlit
ETD	Everhart-Thornley-Detektor	PF	Polygonaler Ferrit
EU	Europäische Union	px	Pixel
FEG	Field Emission Gun	QI	Quality Index
GAM	Grain Average Misorientation	REM	Rasterelektronenmikroskop
GAN	Generative Adversarial Network	RF	Random Forest
GB	Grain Boundary	ROI	Region of Interest
GLCM	Gray-Level Co-Occurrence Matrix	SD	Standardabweichung
GOS	Grain Orientation Spread	SIFT	Scale-Invariant-Feature Transform
Grad-CAM	Gradient Weighted Class Activation Maps	SMOTE	Synthetic Minority Oversampling Technique
GROD	Grain Reference Orientation Deviation	SVM	Support Vector Machine
GWKG	Großwinkelkorngrenzen	TEM	Transmissionselektronenmikroskop
IF	Irregulärer bainitischer Ferrit	TMS	The Minerals, Metals & Materials Society
IoU	Intersection over Union	UB	Unterer Bainit
IPF	Inverse Polfigur	UDA	unsupervised domain adaptation
IQ	Image Quality	UGC	Unique Grain Color
ITP	Incomplete Transformation Product	ZTU	Zeit-Temperatur- Umwandlungsdiagramm
IWM	Fraunhofer Institut für Werkstoffmechanik		

1 Einleitung und Motivation

Die Materialwissenschaft und Werkstofftechnik erlebt aktuell einen Paradigmenwechsel, von erfahrungsbasierten Prozess-Eigenschaftskorrelationen hin zu einer gefügebasierten Werkstoffentwicklung. Das Gefüge nimmt eine zentrale Rolle ein, da es einerseits die Herstellungsgeschichte des Werkstoffes speichert und auf der anderen Seite dessen Eigenschaften bestimmt (Abbildung 1-1). Das Gefüge kann als Multiskalenspeicher aufgefasst werden, der chemische, kristallographische und geometrische Informationen über mehrere Betrachtungsskalen, von der makro- und mikroskopischen bis zur atomaren Skala, speichert. Das Auslesen dieses Speichers ist Aufgabe der Gefügecharakterisierung und Gefügeanalyse. Ziele der Gefügeanalyse sind die Klassifizierung der Gefüge und das Aufstellen von Prozess-Gefüge-Eigenschaftskorrelationen. Sie ist daher relevant für alle Aspekte, die sowohl die Qualitätskontrolle als auch Forschung und Entwicklung betreffen.

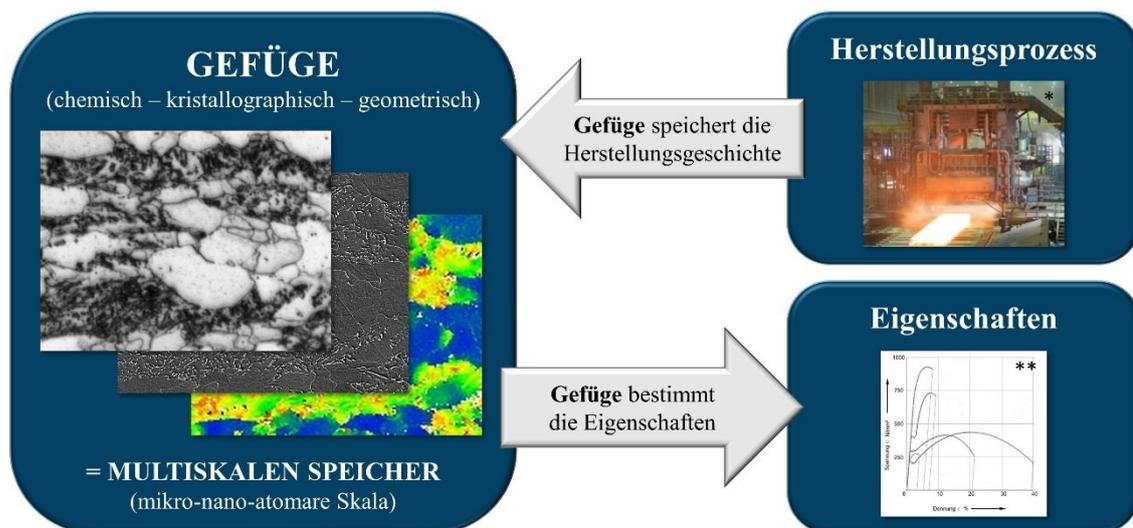


Abbildung 1-1: Gefüge als Multiskalenspeicher, der chemische, kristallographische und geometrische Informationen über mehrere Skalen hinweg enthält. Das Gefüge speichert die Herstellungsgeschichte des Werkstoffes und bestimmt wiederum seine Eigenschaften. Bildquellen: * nach [1], ** modifiziert nach [2].

Durch die zunehmend komplexer und kleiner werdenden Gefügebestandteile in Kombination mit stetig engeren Toleranzen und erhöhten Qualitätsanforderungen in modernen Werkstoffen stoßen die bisherigen Methoden der Gefügeanalyse zunehmend an ihre Grenzen. Dies kann die Charakterisierung mit einfachen Methoden wie der Lichtmikroskopie, die immer noch weit verbreiteten einfachen Segmentierungsansätze wie die Schwellwert-Segmentierung, die manuelle Beurteilung und Klassifizierung von Gefügebildern, oder das Bewältigen immer größerer oder höherdimensionaler Datenmengen betreffen. Hier lässt sich mit Methoden der künstlichen Intelligenz (KI) und des maschinellen Lernens (ML) Abhilfe schaffen. Sie besitzen das Potenzial,

existierende Auswertungen zu verbessern und zu automatisieren sowie neue Auswertungen komplexer Gefüge überhaupt erst zu ermöglichen. Darüber hinaus versprechen sie bessere Objektivität und Reproduzierbarkeit.

Bedingt durch den Erfolg von KI und ML in anderen Disziplinen entsteht auch in der Materialwissenschaft ein regelrechter Hype. Teilweise scheint KI als Allheilmittel gesehen zu werden, auch von Data Scientists ohne den entsprechenden materialspezifischen Hintergrund. Es finden sich daher zunehmend Arbeiten, die nicht nur das benötigte Domänenwissen vermissen lassen, sondern zu fragwürdigem Vorgehen oder auch expliziten Fehlaussagen und - Interpretationen führen. Generell muss die Frage gestellt werden, was zu beachten ist, wenn KI- und ML-Methoden von Informatik- oder Allgemein-Themen auf materialwissenschaftliche Fragestellungen übertragen werden. Insbesondere bei komplexen Gefügen ist es nicht mehr ausreichend, lediglich Gefügebildungen in einen ML-Algorithmus einzugeben. Stattdessen ist die Anwendung ganzheitlich zu betrachten, wobei auch die Schritte hin zum Erhalt einer Gefügebildung sowie materialwissenschaftliche Hintergründe berücksichtigt werden [3,4]. Insbesondere der Zuordnung der Grundwahrheit kommt eine enorme Bedeutung zu. Jedoch werden diese Aspekte aktuell meist nicht oder nur unzureichend diskutiert. Daher ist es notwendig, Methoden, Herangehensweisen und Werkzeuge zu erarbeiten, die eine ganzheitliche Betrachtung einer ML-basierten Gefügeanalyse, inklusive einer objektiven, reproduzierbaren Zuordnung der Grundwahrheit ermöglichen. Nur dadurch wird eine nachhaltig erfolgreiche Anwendung von ML in der Gefügeanalyse, einschließlich der oft genannten Vorteile der Objektivität, Reproduzierbarkeit und Automatisierung überhaupt realisierbar.

In der konsequenten Umsetzung eines gefügebasierten Werkstoffdesigns nimmt die Stahlbranche eine Führungsrolle ein. Stahl ist nach wie vor einer der weltweit wichtigsten Werkstoffe im Ingenieur- und Bauwesen und wird in allen Bereichen unseres Lebens eingesetzt. Um die immer höheren Anforderungen hinsichtlich Qualität, Toleranzen und Wirtschaftlichkeit erfüllen zu können, werden verbesserte Auswertungen benötigt, die wiederum in der Lage sind, die Grundlage der gefügebasierten Werkstoffentwicklung darzustellen. Bainit, als zentraler Gefügebestandteil moderner Hochleistungsstähle mit seiner Vielfalt und Komplexität der mikroskopischen Strukturen stellt in diesem Zusammenhang eine ideale und herausfordernde Fallstudie dar.

Die vorliegende Arbeit behandelt aus diesem Grund Fragestellungen zur Segmentierung und Klassifizierung bainitischer Gefüge mit Hilfe von maschinellem Lernen. Zunächst werden die Grundlagen zu Stahlgefügen und Gefügecharakterisierung (Kapitel 2.1, 2.2) sowie künstlicher Intelligenz und maschinellem Lernen dargestellt (Kapitel 2.3, 2.4). Anschließend werden der ganzheitliche Ansatz motiviert und die zu berücksichtigenden Aspekte definiert (Kapitel 3, 5).

Eine besondere Bedeutung kommt dabei der korrelativen Mikroskopie zu. Es wird ein Ansatz zur kombinierten Gefügequantifizierung aus Daten der Elektronenrückstreubeugung (EBSD) und Mikroskopaufnahmen vorgestellt (Kapitel 6). Dieser ganzheitliche Ansatz und die korrelative Charakterisierung werden schließlich für eine ML-Klassifizierung von Zweiphasenstählen und eine ML-Segmentierung von Multiphasenstählen eingesetzt (Kapitel 7, 8).

2 Grundlagen und Stand der Technik

2.1 Stahl und seine Gefügebestandteile

Aufgrund seiner hervorragenden Eigenschaftskombinationen und der Möglichkeit, maßgeschneiderte Gefüge einzustellen, ist Stahl nach wie vor einer der weltweit wichtigsten Werkstoffe im Ingenieur- und Bauwesen und wird in allen Bereichen unseres Lebens eingesetzt. Neben unterschiedlichen chemischen Zusammensetzungen verdankt der Stahl seine enorme Vielfalt an Eigenschaftskombinationen dem breiten Spektrum an Verarbeitungswegen und Wärmebehandlungen. Es gibt mehr als 3500 Stahlsorten, wovon 75 % erst in den letzten 20 Jahren entwickelt wurden [5].

Diese Vielzahl an Stählen mit unterschiedlichsten Eigenschaften unterscheiden sich unter Berücksichtigung der Chemie und der Herstellungsrouten über den inneren Aufbau – das Werkstoff-Gefüge. Unter dem Begriff des Gefüges versteht man die (Oberflächen-)Struktur, die an speziell präparierten Proben lichtoptisch oder elektronenoptisch beobachtet werden kann [6]. Eine Beschreibung des Begriffes Gefüge lässt sich dem Werk von Dahl ([6], S. 219f) entnehmen werden. Die wesentlichen Aspekte sind im Folgenden zusammengefasst: Ein Gefüge besteht aus unterschiedlichen Bereichen mit einheitlicher Ausrichtung der Elementarzellen, den Kristalliten. Kristallite mit derselben Gitterstruktur werden als eine Phase zusammengefasst. Gefügebestandteile können aus einer Phase, aber auch aus mehreren Phasen, sog. Phasengemengen, bestehen. Defektstrukturen, wie Grenzflächen, Versetzungen und Punktdefekte sind ebenfalls Teil des Gefüges. Gefüge werden i.d.R. über Volumenanteil, Form, Größe, Anordnung oder Orientierung der verschiedenen Phasen und Defekte beschrieben. Zusätzlich können bestimmte Aspekte wie Strukturtyp und chemische Zusammensetzung der einzelnen Phasen oder der Typ der Defektstruktur näher spezifiziert werden ([6], S. 219f).

Unter Stahl werden Eisen-Kohlenstoff-Legierungen mit Eisen als Hauptkomponente und einem C-Gehalt von bis zu 2,06 Gew.-% verstanden [7]. Kohlenstoff ist das wichtigste Legierungselement, zusätzlich wird noch eine Vielzahl weiterer Legierungselemente in unterschiedlichsten Mengen verwendet. Bei C-Gehalten größer 2,06 Gew.-% wird von Gusseisen gesprochen. Das Eisen-Kohlenstoff-Diagramm (EKD) fasst die Gefügeänderungen in Abhängigkeit von Temperatur und Kohlenstoffgehalt zusammen (Abbildung 2-1). Für technische Fe-C-Legierungen ist lediglich das metastabile EKD (System Fe-Fe₃C) relevant. Es handelt sich um eine vereinfachte Darstellung, da keine weiteren Legierungselemente beachtet werden, die das Diagramm allerdings entscheidend verändern können. Außerdem wird lediglich eine gleichgewichtsnaher Abkühlung berücksichtigt. Dennoch ist das EKD grundlegend für das Verständnis der Gefügeentwicklung von Fe-C-Legierungen. Seine Aussagekraft wird jedoch

umso geringer, je schneller abgekühlt oder aufgeheizt wird, und je größer der Gehalt an Legierungselementen ist [8].

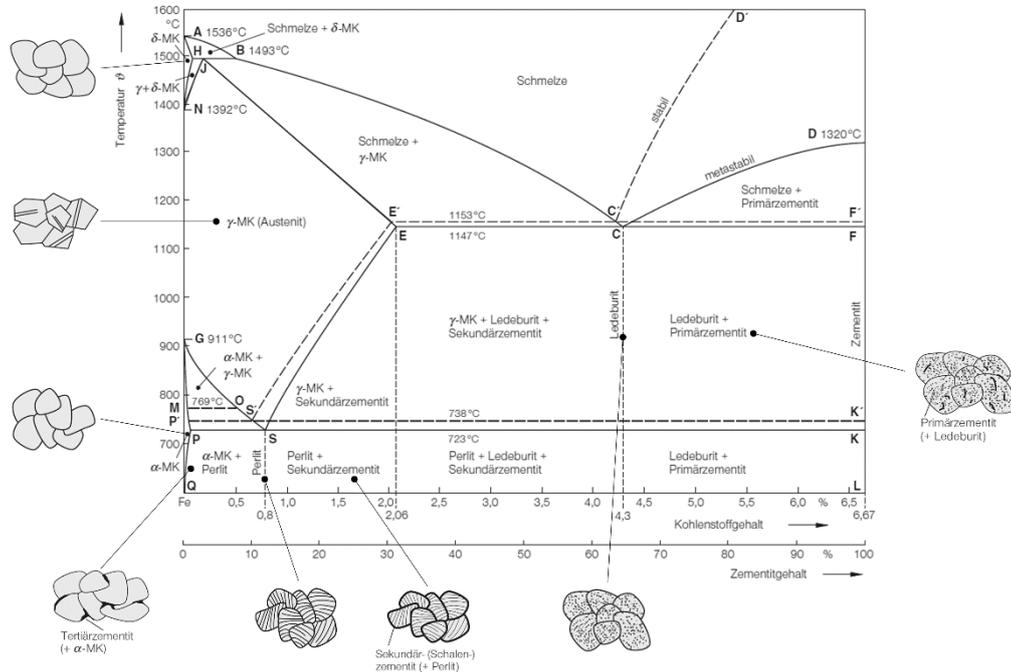


Abbildung 2-1: Metastabiles Eisen-Kohlenstoff-Diagramm (System Fe-Fe₃C), modifiziert nach [8].

Die im festen Zustand auftretenden Phasen sind der δ -Mischkristall, der γ -Mischkristall, der α -Mischkristall sowie Zementit (Fe₃C). Der δ -Mischkristall ist bei den hier betrachteten niedrig legierten Stählen für die finalen Gefüge nicht von Bedeutung.

Der γ -Mischkristall ist besser bekannt als **Austenit**. Es handelt sich um eine Hochtemperaturphase, die bei niedrig legierten Stählen nicht bis Raumtemperatur stabil ist. Austenit hat ein kubisch-flächenzentriertes Gitter. Dessen Gitterlücken bedingen die hohe C-Löslichkeit von 2,06 Gew.-% bei 1147 °C. Der Zustand des homogenen Austenits ist i.d.R. das Ausgangsgefüge für technische Wärmehandlungen und Warmumformungen [6]. Der α -Mischkristall, der üblicherweise als **Ferrit** bezeichnet wird, ist bis Raumtemperatur stabil und hat ein kubisch-raumzentriertes Gitter. Die maximale C-Löslichkeit von lediglich 0,02 Gew.-% bei 723 °C ist durch die Gitterlücken des kubisch-raumzentrierten Gittern begründet. Ferrit ist sehr weich (60HV, [8]). **Zementit** hat eine rhomboedrische Gitterstruktur, ist extrem hart und spröde (800HV, [8]). Es wird zwischen Primärzementit (Primärkristallisation aus der übereutektischen Schmelze, Linie CD in Abb. 2-1), Sekundärzementit (Ausscheidung aus dem übereutektoiden Austenit, Linie ES) und Tertiärzementit (Ausscheidung aus dem Ferrit, Linie PQ) unterschieden. Als Phasengemenge treten außerdem Perlit und Ledeburit auf. **Ledeburit** entsteht als Produkt der eutektischen Reaktion (Punkt C bzw. Linie EF in Abbildung 2-1) durch Zerfall der Schmelze in

die beiden Phasen Austenit und Zementit. Ledeburit ist für Stähle nicht relevant. **Perlit** entsteht durch den eutektoiden Zerfall von Austenit in die beiden Phasen Ferrit und Zementit. Das Gefüge ist gekennzeichnet durch die abwechselnde Anordnung von Ferrit- und Zementit-Platten (i.d.R. als Lamellen bezeichnet, Abbildung 2-2). Sie entsteht durch die alternierende, kooperative An- und Abreicherung von Kohlenstoff und der daraus resultierenden alternierenden Keimbildung und Keimwachstum von Ferrit und Zementit in einzelnen Lamellen [7].

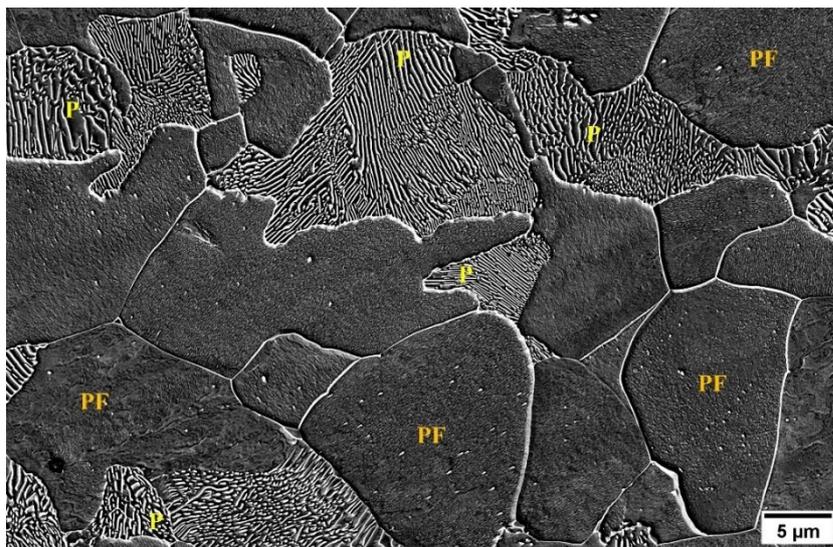


Abbildung 2-2: Zweiphasenstahl: Perlitische Zweitphase Objekte (P) in einer Matrix aus polygonalem Ferrit (PF).

Damit sich die im EKD dargestellten Gefügebestandteile bilden, sind die dafür notwendigen Diffusionsvorgänge und dementsprechend ausreichend lange Zeiten bzw. kleine Abkühlraten erforderlich. Bei realen technischen Prozessen, wie der Erstarrung von Gusslegierungen, oder Wärmebehandlungen und thermomechanischen Behandlungen sind die Abkühlgeschwindigkeiten deutlich schneller und es finden keine gleichgewichtsnahen Umwandlungen mehr statt. Stattdessen wird der Austenit unterkühlt, d.h. die Umwandlung erfolgt bei tieferen Temperaturen als den Gleichgewichtstemperaturen [8]. In sog. Zeit-Temperatur-Umwandlungs-Diagrammen (ZTU, Abbildung 2-3) werden die von Temperatur und Zeit abhängigen Gefügeumwandlungen für eine feste chemische Zusammensetzung dargestellt [8]. Damit kann auch die Entstehung nicht gleichgewichtsnaher Gefüge wie Martensit und Bainit dargestellt werden.

Die resultierenden Gefüge hängen entscheidend von der Umwandlungstemperatur ab, die die Diffusion von Kohlenstoff und Legierungselementen bestimmt. Mit sinkender Temperatur nimmt die Beweglichkeit der Kohlenstoffatome ab, sodass sich überwiegend die Form, Größe und Verteilung der Karbide in den entstehenden Gefügen verändern wird [8]. Legierungselemente üben ihre Wirkung durch Beeinflussung der Diffusion von Kohlenstoff und Eisen aus [8].

Grundsätzlich kann der unterkühlte Austenit in drei Temperaturbereichen umwandeln, wobei es wegen der unterschiedlichen Diffusionsbedingungen zu sehr unterschiedlichen Gefügeausbildungen kommt: Perlitstufe, Bainit- bzw. Zwischenstufe, Martensitstufe.

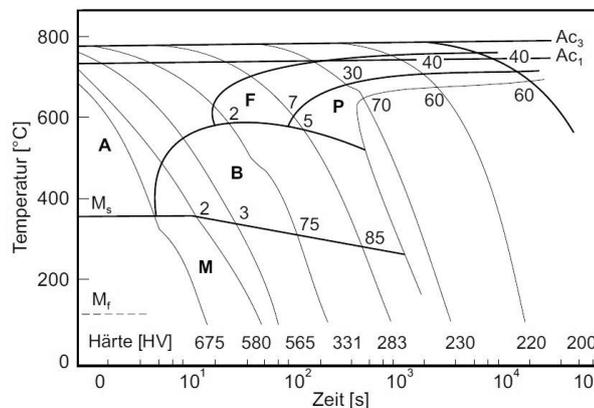


Abbildung 2-3: Kontinuierliches ZTU-Diagramm des Stahls 42CrMo4, modifiziert nach [7]: Bei langsamer, gleichgewichtsnaher Abkühlung bildet sich ein Ferrit-Perlit-Gefüge mit geringer Härte. Bei schnellerer Abkühlung werden die Umwandlungsbereiche von Bainit und Martensit durchlaufen, was zu höheren Härten führt. Legende: A = Austenit, F = Ferrit, P = Perlit, B = Bainit, M = Martensit. Gefügemengen sind in Prozent entlang der Abkühlkurven vermerkt.

Die Umwandlungen in der **Perlitstufe** sind diffusionskontrolliert. Die Perlitbildung wird nach unten durch die Temperatur begrenzt, bei der die für die Perlitumwandlung notwendige Eisendiffusion zu langsam abläuft [6]. Je schneller die Abkühlgeschwindigkeit, desto kleiner der Perlitlamellenabstand und desto höher die Härte [8]. Bei hoher Bildungstemperatur und/ oder durch Legierungselemente ist auch sog. „entarteter Perlit“ möglich, bei dem das Wachstum von Ferrit und Zementit teilweise unabhängig abläuft, sodass anstelle der lamellaren Anordnung eine körnige entsteht [6].

Aufgrund des diffusionskontrollierten Charakters wird auch die Bildung des Ferrits der Umwandlung in der Perlitstufe zugeordnet [6]. Charakteristischstes Merkmal des Ferrits ist seine polyedrische Form. Da die Ferritbildung in Bezug auf Zeit und Temperatur vor der Perlitbildung stattfindet, wird dieser polygonale Ferrit auch voreutektoider Ferrit genannt, zur Abgrenzung des eutektoiden Ferrits im Perlit [6]. Bei Abkühlung von hohen Temperaturen und/ oder grobkörnigen Gefügen entsteht sog. Widmanstätten Ferrit, der sich durch von den Austenitkorngrenzen ins Korn hineinwachsende Ferritplatten auszeichnet [6,8]. Widmanstätten Ferrit ist typisch für Gussgefüge und Schweißverbindungen [6,8]. Die Bildung des voreutektoiden Zementits wird ebenfalls der Perlitstufe zugeordnet [6], ist für niedrig legierte, untereutektoide Stähle allerdings nicht relevant.

Ist die Abkühlung so schnell, dass weder eine Ferrit-, Perlit- noch Bainit-Bildung möglich ist, entsteht das Gefüge **Martensit** (Abbildung 2-4a). Im Gegensatz zur Perlitstufe, in der Kohlenstoff

und Eisen noch leicht diffundieren können und sich grobe Karbide bilden, ist in der Martensitstufe weder Kohlenstoff- noch Eisendiffusion möglich, sodass keine Karbide ausgeschieden werden. Stattdessen klappt das kubisch-flächenzentrierte Gitter des Austenits in ein kubisch-raumzentriertes Gitter um und der Kohlenstoff bleibt auf den Zwischengitterplätzen zwangsgelöst, was zu einer tetragonalen Verzerrung führt [6–9]. Wegen der nicht möglichen Diffusion finden keine Platzwechsel einzelner Atome statt. Stattdessen treten gemeinsame Platzwechsel von Atomgruppen in einer kooperativen Bewegung auf [6]. Der Umklappvorgang hat eine Formänderung des umgewandelten Bereichs zur Folge, bestehend aus einer Scherung und Volumenexpansion [9]. Daher wird die Martensitbildung auch als diffusionslose Scherumwandlung oder displazive Phasenumwandlung bezeichnet. In Abhängigkeit des C-Gehaltes werden Latten- und Plattenmartensit unterschieden. Latten-Martensit, der teilweise auch als Lanzett- oder Massiv-Martensit bezeichnet wird [7], tritt bei C-Gehalten kleiner 0,4-0,5 Gew.-% auf [6,7,9]. Er wächst in Form von Paketen aus parallelen Latten (max. 1 μm Breite) in den Austenit, ohne Restaustenit zurückzulassen [7]. Die Anpassung der Gitterscherung und Verzerrungen erfolgt über Versetzungen. Ab ca. 0,2 Gew.-% C beginnt die tetragonale Verzerrung des Gitters durch die zwangsgelösten Kohlenstoffatome [7]. Zwischen 0,4-0,5 und 0,8-1,0 Gew.-% C liegen Latten- und Plattenmartensit gemeinsam vor, über 0,8-1,0 Gew.-% C Plattenmartensit allein [6,7,9]. Die Anpassung der Gitterscherung und Verzerrungen erfolgt über Versetzungen und Zwillingsbildung. Die tetragonale Verzerrung nimmt mit dem C-Gehalt zu [7,9].

Die martensitische Umwandlung beginnt bei Unterschreiten der Martensitstarttemperatur und endet bei der Martensitfinishtemperatur. Bei zunehmenden C- und Legierungsgehalten (z.B. Chrom, Mangan, Nickel, Molybdän) verschieben sich Umwandlungsbeginn und -ende zu tieferen Temperaturen [6–9]. Liegt die Martensitfinishtemperatur unterhalb der Raumtemperatur, verbleibt Restaustenit im Gefüge.

In diversen Stahlgüten können sog. Martensit-Austenit-Bestandteile (M/A) auftreten. Dabei handelt es sich um lokale Bereiche mit angereichertem Austenit, der bei der Abkühlung auf Raumtemperatur nicht oder nur teilweise in Martensit umwandelt [3]. Da diese Bereiche oft in Form kleiner Partikel oder dünner Filme vorliegen, ist eine finale Unterscheidung zwischen Martensit und Austenit nicht immer möglich. Und da auch sowohl Martensit als auch Austenit zusammen auftreten können, hat sich der Begriff Martensit-Austenit-Bestandteil etabliert.

Martensit ist durch den zwangsgelösten Kohlenstoff, die Verspannung des Gitters und die feinen Latten bzw. Platten sehr hart, aber auch spröde [9]. Die Sprödigkeit kann durch eine Anlass-Wärmebehandlung reduziert werden. Dabei werden Karbide ausgeschieden und Versetzungen reduziert [7–9]. Beim sog. Selbst-Anlassen führt eine langsamere Abkühlung unterhalb der

Martensitstarttemperatur, z.B. bei Grobblechen durch die im Blech verbliebene, noch nicht abgeführte Wärme, in den zuerst gebildeten Martensitbereichen zur Ausscheidung von Karbiden (Abbildung 2-4b) und damit einer Härteabnahme [7,9]. Angelassener Martensit und unterer Bainit zeigen ähnliche Erscheinungsformen. Unterscheidbar sind sie über die statistisch verteilte Orientierung der Karbide im angelassenen Martensit im Vergleich zur 60 ° Vorzugsorientierung im unteren Bainit [10].

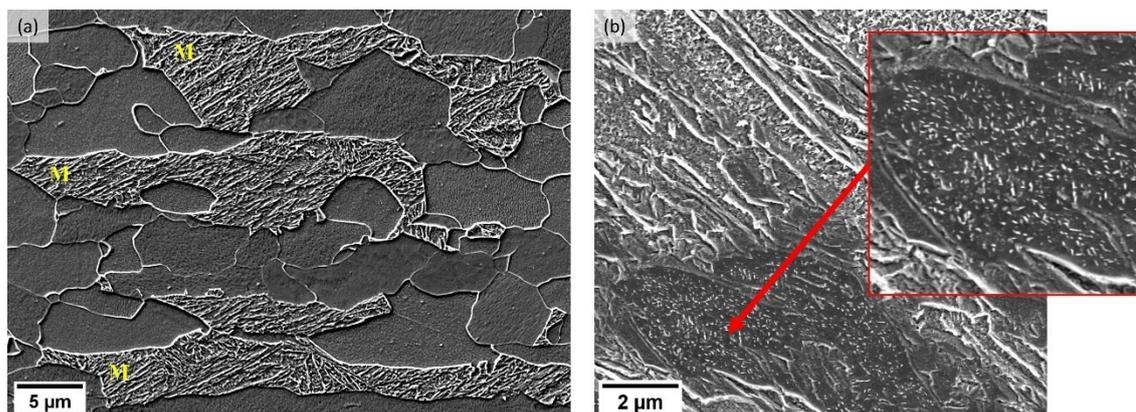


Abbildung 2-4: (a) Martensitische Zweitphase Objekte (M) in der ferritischen Matrix eines Zweiphasenstahls. (b) Martensitisches Gefüge mit selbstangelassenen Bereichen, mit regelloser Anordnung der ausgeschiedenen Karbide (roter Pfeil).

Bainit weist sowohl Anteile einer diffusionskontrollierten Perlitumwandlung als auch einer diffusionslosen Martensitumwandlung auf. Im deutschen Sprachgebrauch ist für Bainit daher die alte Bezeichnung Zwischenstufengefüge immer noch verbreitet. Am Beispiel eines niedriglegierten, eutektoiden Stahls entsteht Perlit im Temperaturbereich 720-550 °C und Martensit bei Temperaturen kleiner 250 °C, während sich zwischen 550-250 °C bainitische Gefüge bilden [9]. Die Abkühlraten für Bainit müssen also hoch genug sein, um eine Perlitbildung zu vermeiden, jedoch nicht so hoch, dass sich Martensit bildet. Eisendiffusion ist nicht mehr möglich, die Kohlenstoff-Diffusion eingeschränkt [6,8]. Bainitische Gefüge zeigen komplexe, feine Strukturen, die mittels Lichtmikroskop i.d.R. nicht mehr vollständig zu erfassen sind [6,8]. Stattdessen werden Methoden wie Rasterelektronenmikroskop oder Elektronenrückstreubeugung benötigt [10]. Aufgrund der Lage der bainitischen Umwandlung zwischen Perlit- und Martensitbildung könne erwartet werden, dass Bainit Charakteristika dieser beiden Umwandlungen und Gefüge zeigt [6]. Tatsächlich ist die Bainit-Bildung ähnlich der des Martensits, lediglich dass im Gegensatz zum Martensit eine Partitionierung des Kohlenstoffs stattfindet [11,12]. Dies führte zu der Kontroverse, ob die Bildung diffusionskontrolliert oder displaziv ist. Laut der diffusionskontrollierten Bildungstheorie erfolgen Keimbildung und -wachstum des Bainits über einen rekonstruktiven Mechanismus. Da die Wachstumsrate entlang der Kantenrichtung größer ist, nimmt die Länge der Keime bzw. Untereinheiten schneller zu als

die Dicke, was zur Ausbildung und Ausbreitung von Platten (engl. ledges) führt. Zementit und bainitischer Ferrit wachsen gleichzeitig und kooperativ [13,14]. Gemäß der displaziv-kontrollierten Bildungstheorie beginnt die Bainitumwandlung mit der Nukleation einer Untereinheit, analog zur Nukleation bei Martensit, jedoch mit einer Partitionierung des interstitiellen Kohlenstoffs. Diese Untereinheit wächst displaziv bis das Wachstum durch plastische Verformung des umgebenen Austenits gestoppt wird. Der Kohlenstoff wird dann aus dem übersättigten bainitischen Ferrit durch Diffusion ausgeschieden, entweder im Austenit oder innerhalb der Untereinheiten. Neue Untereinheiten bilden sich an den Spitzen der vorherigen Untereinheiten und wachsen von dort aus [12,14,15]. Obwohl die Kontroverse zur Bainitbildung seit vielen Jahrzehnten besteht, konnte bis heute keine Einigkeit erzielt werden. Erschwert wird die Kontroverse dadurch, dass direkte experimentelle Beweise schwierig zu erbringen sind, sodass indirekte Nachweise geführt werden müssen, die teilweise zugunsten beider Theorien interpretiert werden können [14]. Tendenziell kann in der Fachliteratur jedoch eine Bevorzugung der displaziv-kontrollierten Bildungstheorie beobachtet werden.

Es existieren drei Definitionen für Bainit [13,16]. Die **verallgemeinerte mikrostrukturelle Definition** beschreibt Bainit als das Produkt eines kompetitiven (d.h. nicht-lamellaren, nicht-kooperativen) Mechanismus des eutektoiden Zerfalls [13,16]. Laut der **Definition der Reaktionskinetik** weist Bainit eine eigene C-Kurve in Umwandlungsschaubildern auf. Eine obere Grenztemperatur für die Bainitbildung, die deutlich unter der eutektoiden Temperatur liegt, sowie das Phänomen der unvollständigen Umwandlungsreaktion werden dort berücksichtigt [13,14]. Die **Oberflächenrelief-Definition** beschreibt Bainit als ein plattenförmiges Produkt, das in Folge einer Scherung auf einer polierten Oberfläche ein Relief erzeugt [13,14].

Problematisch dabei ist, dass nicht alle drei Definitionen gleichzeitig zutreffen können, und dass zwei dieser Definitionen auch eine bestimmte Bildungstheorie implizieren [14]. Solange keine Einigkeit über die Definition von Bainit besteht, wird auch keine Einigkeit über seine Bildung herrschen. Einige Aspekte hinsichtlich Bainit sind dennoch allgemein anerkannt. Dabei handelt es sich um die Unterscheidung von oberem und unterem Bainit, das Vorhandensein einer Bainit-Starttemperatur und das Phänomen der unvollständigen Umwandlungsreaktion [14]. Die unterschiedlichen Bildungstheorien sind zur Modellierung der Phasenumwandlung und deren Kinetik relevant [14], und darüber für die Entwicklung neuer bainitischer Stähle [17,18]. Für die Beurteilung einer bainitischen Gefügaufnahme wird sich mit Bildungstheorien und den verschiedenen Bainitdefinitionen i.d.R. jedoch nicht vertieft auseinandergesetzt. Vielmehr wird überwiegend lediglich die gefügebasierte Definition herangezogen, und Bainit, zurückgehend auf die von Aaronson 1969 eingeführte Beschreibung, betrachtet als „ein nicht-lamellares Zweiphasengemenge aus Ferrit und Karbiden, bei dem sich die Phasen nacheinander bilden (im

Gegensatz zu Perlit, bei dem sie sich kooperativ bilden)“ [19]. Vereinfacht entsteht Bainit also durch eine zweistufige Umwandlung. Zunächst bildet sich der bainitische Ferrit (diffusiv oder displaziv), danach entstehen diffusionskontrolliert Karbide. Im Vergleich zum polygonalem (voretaktoiden) Ferrit hat der bainitische Ferrit eine hohe Versetzungsdichte und eine nadel- bzw. plattenförmige oder irreguläre Struktur [6].

Ebenfalls losgelöst von Bildungstheorien und Bainit-Definitionen wurden in der Literatur diverse Bainit-Unterklassen vorgeschlagen, die in späteren Kapiteln behandelt werden (2.1.1, 10.1). Bisher existieren keine allgemeingültige oder akzeptierte Systematik und Terminologie dieser Bainit-Unterklassen, was die Thematik Bainit weiter erschwert. Lediglich oberer, unterer und granularer Bainit sind allgemein anerkannte Unterklassen.

Die Bildung des Bainits beginnt in Form von Ferrit-Platten, die an ehemaligen Austenitkorngrenzen nukleieren. Die Platten wachsen in Form von Bündeln (engl. sheaves) in das ehemalige Austenitkorn hinein. Innerhalb jedes Bündels sind die Platten parallel und haben die gleiche kristallographische Orientierung. Die einzelnen Platten werden oft als Untereinheit des Bainits (engl. sub-unit) bezeichnet. Da der bainitische Ferrit nur eine geringe Kohlenstoff-Löslichkeit aufweist, reichert sich beim Wachstum der Ferrit-Platten der umgebende Austenit mit Kohlenstoff an [6,9]. Nach diesem ersten Umwandlungsschritt folgt der zweite, diffusionsgesteuerte Teil der Umwandlung. Dieser ist abhängig vom Temperaturbereich der Umwandlung.

Oberer Bainit (Abbildung 2-5a) bildet sich im oberen Temperaturbereich der Umwandlung und zeigt eine gewisse Ähnlichkeit zum Perlit [8]. Aufgrund der bei diesen Temperaturen noch ausreichenden Diffusionsfähigkeit des Kohlenstoffs scheidet er sich aus dem angereicherten Restaustenit zwischen den Ferritplatten als Karbid aus [6,8,9]. Der Anteil ausgeschiedenen Zementits hängt vom Kohlenstoffgehalt des Stahls ab. Hohe Kohlenstoffgehalte führen zu kontinuierlichen Karbidfilmen zwischen den Ferritplatten, niedrige Kohlenstoffgehalte zu diskreten Karbidpartikeln [9].

Unterer Bainit (Abbildung 2-5b) bildet sich im unteren Temperaturbereich der Umwandlung und zeigt eine gewisse Ähnlichkeit zum angelassenen Martensit [8]. Da die Diffusionsfähigkeit des Kohlenstoffs bei der niedrigeren Temperatur stark eingeschränkt ist, kann der Kohlenstoff zum Großteil nicht mehr aus den Ferritplatten herausdiffundieren und sich zwischen ihnen als Karbid ausscheiden. Stattdessen scheidet sich Zementit überwiegend im Inneren der wachsenden Ferrit-Platten aus [6,8,9]. Die Karbide sind sehr fein und mit dem Lichtmikroskop nicht mehr erfassbar. Die Ausscheidung erfolgt in Winkel von etwa 60° zur Achse der Ferrit-Platten [6,8,9], bedingt durch eine Anisotropie von Grenzflächenspannung und Verzerrungsenergie [6]. Die

feinen Karbidausscheidungen innerhalb der Ferrit-Platten sind die Ursache für die höhere Festigkeit und Zähigkeit des unteren Bainits im Vergleich zum oberen Bainit.

Bei Stählen mit hohem C-Gehalt entsteht üblicherweise nur unterer Bainit, da die Menge gelösten Kohlenstoffs so groß ist, dass er niemals vollständig aus den Ferritlatten herausdiffundieren kann [9]. Dagegen bildet sich bei Stählen mit niedrigem C-Gehalt nur oberer Bainit, da dort die für die C-Diffusion benötigte Zeit so gering ist, dass der gesamte Kohlenstoff entkommen kann [9]. Generell können auch Mischformen aus oberem und unterem Bainit auftreten, wenn sich zunächst der obere Bainit bildet und der verbleibende Austenit mit Kohlenstoff angereichert wird, sodass er dadurch anschließend in unterem Bainit umwandelt [9].

Oberer und unterer Bainit entstehen in erster Linie in Folge einer isothermen Umwandlung. Bei kontinuierlicher Abkühlung bildet sich überwiegend **granularer Bainit** (Abbildung 2-5c) [9,20]. Darunter wird allgemein ein Gefüge aus irregulärem Ferrit mit diskreten Inseln einer kohlenstoffreichen Zweitphase (Restaustenit, Martensit, Karbide) zwischen den Ferritkörnern verstanden [10,20]. Sein Entstehungsmechanismus entspricht zwar dem des oberen und unteren Bainits [9], da sich das Gefüge jedoch während der Abkühlung graduell entwickelt, können die Bainit-Bündel vergleichsweise grob werden, was zum typischen Erscheinungsbild von Blöcken aus Ferrit und Restaustenit führt [9]. Üblicherweise stabilisiert der aus dem bainitischen Ferrit partitionierende Kohlenstoff den Austenit, sodass aus diesem keine Karbide ausgeschieden werden [9].

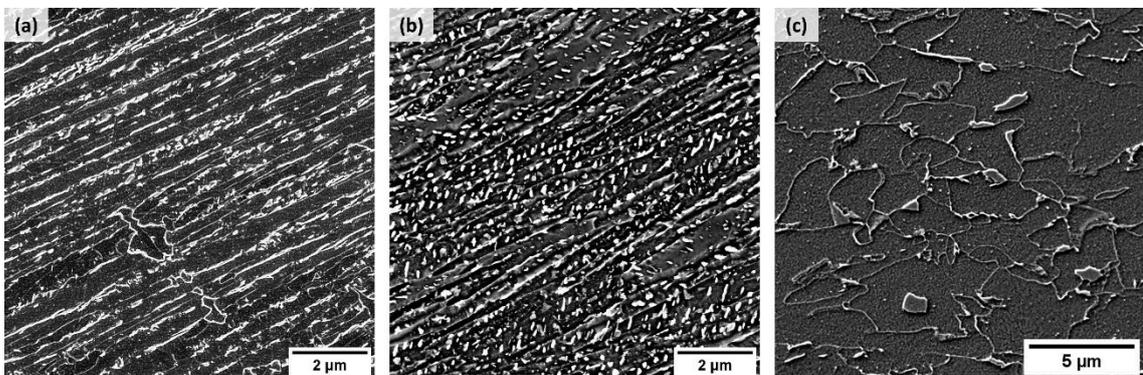


Abbildung 2-5: Exemplarische bainitische Gefüge: (a) oberer Bainit, (b) unterer Bainit mit ca. 60° Vorzugsorientierung der Karbidausscheidungen, (c) granularer Bainit.

2.1.1 Klassifizierungsschemata Stahl und Bainit

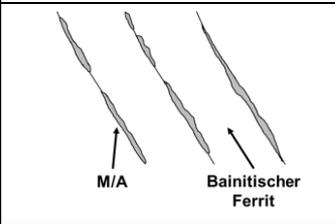
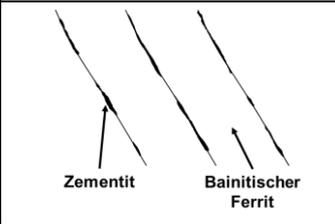
Die große Vielfalt an Gefügebestandteilen gilt es sowohl im Rahmen einer Qualitätskontrolle, bspw. der Abnahme, ganz besonders jedoch auch in der Forschung und Entwicklung möglichst exakt zu erfassen. Um dies systematisch tun zu können, wurden unterschiedliche Klassifizierungssysteme definiert.

Einfache Methoden zum Einteilen der Stähle, i.d.R. in Form von Normen, basieren auf dem Anwendungszweck (z.B. DIN EN 10027-1: Einteilung nach Verwendung und mechanischen und physikalischen Eigenschaften, [21]) oder der chemischen Zusammensetzung bzw. dem Legierungsdesign (z.B. DIN EN 10027-1 oder DIN EN 10020, [22]). Ebenso werden Stähle nach der dominierenden Gefügeausprägung in Grundtypen wie Ferrit-Perlit, Bainit, Martensit oder Austenit klassifiziert [20]. Diese simplen Einteilungen können die kontinuierlich steigende Komplexität moderner Stahlgefüge allerdings nicht mehr erfassen, bspw. Multiphasenstähle mit mehr als zwei dominierenden Gefügebestandteilen. Daher werden im Folgenden Schemata betrachtet, die eine Klassifizierung von Multiphasenstählen inklusive Berücksichtigung mehrerer Bainit-Arten erlauben.

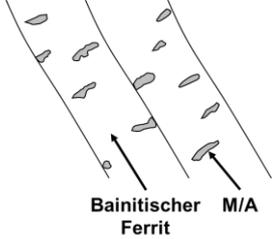
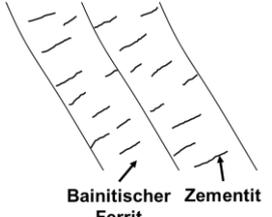
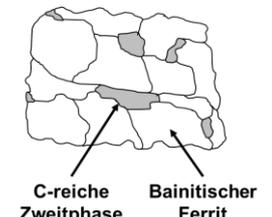
Die kontinuierliche Weiterentwicklung von Legierungskonzepten und Verarbeitungsprozessen hat zu einer immer größeren Vielfalt und Komplexität an bainitischen Strukturen geführt, sodass die einfachen ersten Klassifizierungsschemata wie oberer und unterer Bainit nicht mehr ausreichen. Entscheidend dazu beigetragen hat auch, dass viele bainitische Gefüge durch eine kontinuierliche Abkühlung anstelle isothermer Transformation entstehen [20]. Diese Vielfalt spiegelt sich in der Uneinigkeit der Experten in der Benennung und Klassifizierung dieser Gefüge wider, sowie in der nicht konsistenten Beschreibung in der Literatur. Dementsprechend wurde bereits eine Vielzahl an Klassifizierungsschemata vorgeschlagen.

Betrachtete Stähle in der vorliegenden Arbeit sind niedrig legierte, hochfeste Konstruktions- und Linepipe-Güten, in Form sog. Zweiphasen- und Multiphasenstähle mit signifikantem Anteil bainitischer Gefüge. Das für die vorliegende Arbeit relevanteste Schema ist das nach Zajac et al. [10]. Basierend auf REM-Aufnahmen werden fünf verschiedene Bainitarten definiert, siehe Tabelle 2-1.

Tabelle 2-1: Bainitarten gemäß Schema nach Zajac [10].

Bainitart	Beschreibung	Skizze
Degenerierter oberer Bainit	Lattenförmiger Ferrit mit M/A auf den Lattengrenzen	
Oberer Bainit	Lattenförmiger Ferrit mit Zementit-Ausscheidungen auf den Lattengrenzen	

Fortsetzung von Tabelle 2-1

<p>Degenerierter unterer Bainit</p>	<p>Lattenförmiger Ferrit mit M/A innerhalb der Latten</p>	 <p>Bainitischer Ferrit M/A</p>
<p>Unterer Bainit</p>	<p>Lattenförmiger Ferrit mit Zementit-Ausscheidungen innerhalb der Latten</p>	 <p>Bainitischer Ferrit Zementit</p>
<p>Granularer Bainit</p>	<p>Irreguläre Ferritkörner mit dazwischen verteilter C-reicher Zweitphase Körner zeigen irreguläre Korngrenzen und Substruktur Keine Karbide, stattdessen C-angereicherter Austenit, aus der verschiedene Umwandlungsprodukte entstehen können</p>	 <p>C-reiche Zweitphase Bainitischer Ferrit</p>

Charakteristisches Merkmal des granularen Bainits ist das Fehlen von Karbiden. Stattdessen partitioniert der Kohlenstoff, der während der Bildung des bainitischen Ferrits frei wird, in den restlichen Austenit. Aus diesem C-angereicherten Austenit können verschiedene Umwandlungsprodukte entstehen (Tabelle 2-2).

Tabelle 2-2: Umwandlungsprodukte im granularen Bainit gemäß Schema nach Zajac [10].

Zweitphase im granularen Bainit	Beschreibung
Degenerierter Perlit	Wenn bei hohen Temperaturen noch ein kooperatives Wachstum von Ferrit und Zementit möglich ist, können sich kleine „Knollen“ von degeneriertem Perlit bilden
„Zementit-Bruchstücke“ (engl. Debris of Cementite)	Chaotisches Gemenge aus Ferrit und Zementit, sowohl im Korninneren als auch an Korngrenzen
Bainit	Bei höheren Abkühlraten Mit Zementit oder M/A Ausscheidungen
Produkte unvollständiger Umwandlung (engl. „mixture of incomplete transformation products“)	Bestehen aus fragmentierten Ferrit-, Zementit- und M/A-Bruchstücken, die sich bilden, wenn der Austenitzerfall aufgrund von Legierungselementen, die die Ferritwachstumsraten verringern, aufhört, so dass sich der Restaustenit in ein ungewöhnliches Gefüge umwandelt Treten auf als separate Körner, in Kornzwickeln irregulären Ferrits oder als Teil großer irregulärer Ferritkörner
Martensit/Austenit Bestandteile	Von vollständig austenitisch bis vollständig martensitisch

Ein weiterer Gefügebestandteil, der in diesen niedrig C-haltigen Stählen auftritt, ist Latten-Martensit, der in diesen Stählen immer selbst-angelassen ist [10]. Die Morphologie ähnelt der des unteren Bainits, nur dass die Karbid-Ausscheidungen hier regellos verteilt sind, im Gegensatz zur Vorzugsausrichtung im unteren Bainit.

Zusätzlich zur Klassifizierung auf REM-Basis definieren Zajac et al. [10,23] auch eine EBSD-basierte Klassifizierung von unterem, oberem und granularem Bainit (Tabelle 2-3). Ausschlaggebend ist die Verteilung der Missorientierungswinkel.

Tabelle 2-3: EBSD-basierte Klassifizierung von unterem, oberem und granularem Bainit gemäß Schema nach Zajac [10,23].

Bainitart	EBSD-Charakteristika	Missorientierungsverteilung
Unterer Bainit	Hoher Anteil an Missorientierungen im Winkelbereich 50-60 ° Geringer Anteil an Missorientierungen < 20 °.	
Oberer Bainit	Hoher Anteil an Missorientierungen < 20 ° Geringer Anteil an Missorientierungen > 50 °	
Granularer Bainit	Weitestgehend zufällige Missorientierungswinkelverteilung mit einem breiten Peak im Bereich 45 ° Durch Substrukturen kleiner Peak bei Missorientierungen < 20 °	

Da für die Ferritarten in Multiphasenstählen eine Vielzahl an Bezeichnungen existiert, ist es außerdem nötig, die Ferritarten in den in der vorliegenden Arbeit betrachteten Stahlgefügen zu definieren und voneinander abzugrenzen. Berücksichtigt werden polygonaler Ferrit und bainitischer Ferrit, der wiederum in lattenförmige und irreguläre Erscheinungsformen unterteilt wird, siehe Tabelle 2-4. Dabei wurde sich am Micro-quant Projekt („Microstructural quantification of multi-phase steels“, Aarnts et al. [3]) orientiert, welches u.a. morphologische und kristallographische Charakteristika verschiedener Gefügebestandteile in Multiphasenstählen auflistet. Dieses Projekt nimmt eine besondere Stellung ein, da es sich um ein vorwettbewerbliches, EU-gefördertes Projekt mit mehreren Stahlherstellern und Forschungseinrichtungen handelt. Dementsprechend stellen die verwendeten Ansätze und das vorgestellte Schema keine „Insellösung“ dar, wie viele andere Klassifizierungsschemata, sondern bilden einen gewissen Konsens ab.

Tabelle 2-4: Qualitative Beschreibung verschiedener Ferritarten in Multiphasenstählen.

Gefüge	Abkürzung	Qualitative Beschreibung
Polygonaler Ferrit	PF	<ul style="list-style-type: none"> – Diffusionsgesteuerte Bildung bei den höchsten Umwandlungstemperaturen/ geringsten Abkühlraten – Gleichachsige, polyedrische Form – Glatte, kontinuierliche Korngrenzen – Überwiegend Großwinkel-Korngrenzen – Geringe Versetzungsdichte, keine Substruktur – EBSD: hohe IQ, niedrige Missorientierungen
Bainitischer Ferrit	BF	<ul style="list-style-type: none"> – Hier als Oberbegriff für lattenförmigen und irregulären bainitischen Ferrit – Überwiegend displazive Phasenumwandlung im mittleren Temperaturbereich – EBSD: niedrige IQ, hohe Missorientierungen
Lattenförmiger bainitischer Ferrit	LF	<ul style="list-style-type: none"> – Feine, längliche Ferritkörner – Hohe Versetzungsdichte – Lattengrenzen sind überwiegend Kleinwinkelkorngrenzen
Irregulärer bainitischer Ferrit	IF	<ul style="list-style-type: none"> – Viele Gemeinsamkeiten mit nadelförmigem Ferrit – Unterschied: relativ gleichachsige bis irreguläre Form der Ferritkörner – Körner zeigen irreguläre Korngrenzen und Substruktur – Missorientierungen können tendenziell etwas niedriger sein als im LF

Gemäß Zajac et al. [10] wird irregulärer bainitischer Ferrit mit C-reicher Zweitphase als granularer Bainit bezeichnet, und lattenförmiger bainitischer Ferrit mit C-reicher Zweitphase auf den Lattengrenzen, je nach Ausprägung der Zweitphase, als oberer oder degenerierter oberer Bainit.

Weitere Klassifizierungsschemata [3,12,20,24–32] werden im Anhang (10.1) in chronologischer Reihenfolge vorgestellt. Die Vielzahl an Klassifizierungsschemata erschwert das Finden eines gemeinsamen Konsenses zur Beschreibung und Beurteilung bainitischer Gefüge. Das ist sowohl für die (subjektive) manuelle Klassifizierung relevant als auch für eine Klassifizierung mittels ML. In (7.4) werden diese Punkte nochmal aufgegriffen und in Bezug auf eine ML-Klassifizierung diskutiert.

Noch immer wird die Klassifizierung meist rein subjektiv von Experten vorgenommen und ist Ausgangspunkt für eine Vielzahl von Arbeitskreisen und Forschungsprojekten. Bislang gibt es jedoch weder ein einheitliches Bewertungssystem noch eine einheitliche Nomenklatur. Die Notwendigkeit neuer Ansätze, z.B. Unterstützung durch Methoden des maschinellen Lernens, ist daher essenziell und von größter Relevanz.

2.2 Gefügecharakterisierung & -quantifizierung

Im Kontext der gefügebasierten Werkstoffentwicklung sind Ziele der Gefügeanalyse die Klassifizierung der Gefüge und das Aufstellen von Prozess-Gefüge-Eigenschaftskorrelationen. Sie ist daher relevant für alle Aspekte – sowohl was die Qualitätskontrolle als auch Forschung und Entwicklung betrifft. Um das Gefüge auslesen zu können sind allerdings mehrere Schritte – von der metallographischen Präparation, über die Kontrastierung, Segmentierung, Quantifizierung bis zur Klassifizierung – notwendig. Durch die zunehmend komplexeren und kleiner werdenden Gefügebestandteile in Kombination mit stetig engeren Toleranzen und Qualitätsanforderungen in modernen Werkstoffen stoßen die bisherigen Methoden jedoch zunehmend an ihre Grenzen. Dies betrifft bereits die fehlende Reproduzierbarkeit meist empirisch eingesetzter Gefügekontrastierungen bedingt durch fehlendes Verständnis über deren exakter Wirkweisen [33,34]. Das zentrale Problem auf dem Weg zur gefügebasierten Werkstoffentwicklung sind jedoch die Gefügesegmentierung und -klassifizierung, die noch immer oft rein subjektiv von Experten vorgenommen werden.

Die quantitative Gefügeanalyse hat die Aufgabe, das Gefüge von Werkstoffen durch geeignete Parameter quantitativ zu charakterisieren. Sie trifft „Aussagen über die Art und Menge der durch Grenzflächen (Korngrenzen bzw. Phasengrenzen) voneinander getrennten Gefügebestandteile sowie über ihre geometrischen Parameter (Größe, Form, Verteilung und Orientierung)“ ([35], S. 125). Gefügebestandteile können Phasen (z.B. Ferrit, Austenit), Phasengemenge (z.B. Perlit, Bainit), Ausscheidungen (z.B. Karbide), Einschlüsse (z.B. Sulfide, Oxide) oder Poren sein [35]. Grundlegende Parameter zur Beschreibung der Charakteristika von Gefügebestandteilen sind Volumen, ihre Grenzflächen oder Form beschreibende Größen [35].

Eine konventionelle Gefügequantifizierung beginnt mit der Herstellung eines geeigneten, untersuchbaren Schliffes durch Probenentnahme, Schleifen und Polieren (Probenpräparation) sowie ggfs. einer Ätzung zur Kontrastierung aller relevanten Gefügebestandteile (Probenkontrastierung). Anschließend folgt die Aufnahme des Gefüges durch eine geeignete Abbildungstechnik. Durch eine Segmentierung der Gefüge-Aufnahme werden unterschiedliche Gefügebestandteile voneinander separiert. In der Folge werden geeignete Merkmale extrahiert, die eine Quantifizierung und/oder Klassifizierung dieser Gefügebestandteile erlauben. Quantifizierung und Klassifizierung sind wiederum die Grundlage zum Aufstellen von Prozess-Gefüge-Eigenschaftskorrelationen.

2.2.1 Kontrastierung

Vereinzelt können Gefügebestandteile auch ohne vorherige Kontrastierung der Probenoberfläche unterschieden werden, z.B. durch Reflexionsunterschiede einzelner Gefügebestandteile bei der Untersuchung in einem Auflichtmikroskop, durch einen Materialkontrast im Rückstreuелеktronendetektor im Rasterelektronenmikroskop oder bei der Elektronenrückstreubeugung. Für die meisten Untersuchungen in Licht- und Rasterelektronenmikroskop ist allerdings eine Gefügekontrastierung notwendig. Der konventionelle Ablauf ist das Kontrastieren mittels metallographischer Ätzung zum Erzeugen von Topografien oder Farbeffekten, die anschließend bei der mikroskopischen Untersuchung sichtbar sind. Die gebräuchlichsten Kontrastierungen von Stahlgefügen sind elektrochemische Ätzungen, die auf Redoxreaktionen zwischen Ätzlösung und Metall basieren [36]. Grundlage der Kontrastentstehung sind unterschiedliche chemische Potenziale durch verschiedene C- und Legierungsgehalte einzelner Phasen, lokale chemische und physikalische Inhomogenitäten oder Orientierungseffekte, die zu einer unterschiedlich starken Ätzreaktion führen [37]. Es wird zwischen Strukturätzungen und Niederschlagsätzungen unterschieden [38]. Während bei Strukturätzungen Material selektiv abgetragen wird, findet bei Niederschlagsätzungen ein unterschiedlich starkes Schichtwachstum durch die Niederschlagsbildung statt, teilweise auch in Kombination mit einem Ätzabtrag [37]. Neben dem Kontrast durch die Topographie ist der eigentliche Hauptkontrast eine unterschiedliche Färbung der Gefügebestandteile durch Interferenzschichten in Abhängigkeit der Niederschlagsbildung [39]. Daher werden Niederschlagsätzungen gemeinhin auch als Farbätzungen bezeichnet. Durch die zusätzliche Farbinformation bestimmter Gefügebereiche enthalten Farbätzungen zusätzliche Informationen, z.B. über Seigerungen oder Texturen, sind allerdings weniger reproduzierbar und schwieriger zu quantifizieren als Strukturätzungen. Abbildung 2-6 zeigt schematisch eine selektive Phasenätzung eines Stahlgefüges mit Hilfe einer Strukturätzung.

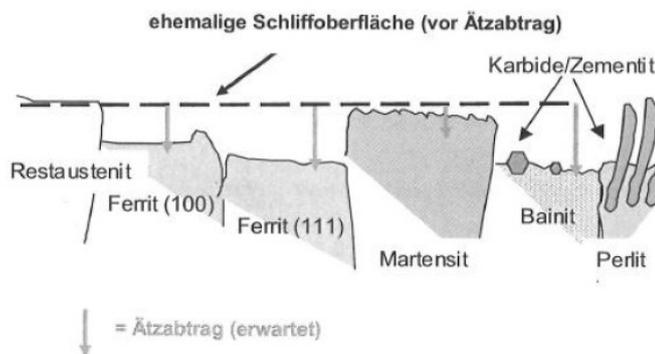


Abbildung 2-6: Schematische Darstellung einer selektiven Phasenätzung von Stahlgefügen [37].

Unterschiede im Ätzabtrag entstehen in erster Linie durch die verschiedenen C-Gehalte, teilweise auch durch Unterschiede in Orientierung und Versetzungsdichte oder durch Konzentrationsgradienten über Korn- und Phasengrenzen [37].

Die Wahl des Ätzmittels ist von der Art der zu kontrastierenden Gefügebestandteile und dem Untersuchungsziel abhängig. Ein „one-fits-all-Rezept“ gibt es nicht. Eine der am weitesten verbreiteten Strukturätzungen zur Kontrastierung niedriglegierter Stähle ist Nital [40]. Weitere bekannte Ätzmittel sind Pikral [40] und Marshall [40,41]. Typische Niederschlagsätzungen sind die Beraha- [34], Klemm- [42] und LePera Ätzung [43]. Eine Übersicht geeigneter Ätzmittel insbesondere zur Kontrastierung von Multiphasenstählen und Empfehlungen hinsichtlich deren Anwendung findet sich in [44].

Die Kontrastierung ist ein entscheidender Schritt in Bezug auf die Identifizierung der Phasen und Gefügebestandteile und die folgende Segmentierung, Klassifizierung und/oder Quantifizierung. Naturgemäß hat die Wahl des Ätzmittels einen starken Einfluss auf die letztliche Gefügeerscheinung. Allerdings kann auch innerhalb eines Ätzmittels durch Parameter wie Zeit, Temperatur, Konzentration oder durch Umgebungseinflüsse eine signifikante Varianz an Gefügeerscheinungen auftreten [39,44], sodass gleiche Gefüge trotz gleichem Ätzmittel unterschiedlich bewertet werden [44]. Daher ist es erforderlich, Anstrengungen zu unternehmen, um Ätzungen besser zu verstehen und deren Reproduzierbarkeit zu gewährleisten [34,39,45].

2.2.2 Korrelative Mikroskopie

Die steigende Komplexität der Gefüge moderner Werkstoffe stellt erhöhte Anforderungen an die Gefüge-Charakterisierung, da eine Charakterisierungsmethode allein nicht immer in der Lage ist, die Komplexität der Gefüge vollständig zu erfassen. Daher ist es ggfs. nötig, mehrere Methoden in einem korrelativen Ansatz zu kombinieren. Dies ermöglicht es außerdem, Vorteile dieser Methoden zu kombinieren, Nachteile zu eliminieren, und Informationen aus komplementären Informationsquellen und über verschiedene Längenskalen hinweg zusammenzuführen.

Zur Gefügebeurteilung ist das Lichtmikroskop (LM) noch immer von grundlegender Bedeutung. Auch große Bereiche können schnell analysiert werden, und mit Hilfe von Ätzungen können diverse Gefügebestandteile unterschieden werden. Die Auflösung ist allerdings auf die halbe Wellenlänge des sichtbaren Lichts begrenzt [35]. Durch die Laser-Scanning-Mikroskopie kann die Auflösung zwar verbessert werden [46], die Substrukturen bestimmter Gefügebestandteile sind allerdings weiterhin nicht auflösbar. Sowohl in Forschung als auch Industrie hat sich das Rasterelektronenmikroskop (REM) zu deren Analyse etabliert. Die höhere Auflösung im Vergleich zum LM sowie verschiedene zur Verfügung stehende Kontrastmechanismen ermöglichen eine bessere, detailliertere Gefügeanalyse. Sollte die Auflösung im REM noch nicht

ausreichend sein, kann das Transmissionselektronenmikroskop (TEM) zum Einsatz kommen. Damit sind Abbildungen von Defektstrukturen, wie Versetzungen, möglich, bis hin zur atomaren Auflösung [47]. Zusätzlich zur Bildgebung sind auch Messungen mittels Beugung und Spektroskopie möglich. Nachteile sind das teure Equipment und der experimentelle Aufwand, insbesondere die Präparation einer dünnen, elektronendurchlässigen Probe. Eine weitere weit verbreitete Methode ist die Elektronenrückstreubeugung (EBSD) im REM. Mittels EBSD-Messungen werden lokal Orientierungen und Phasen bestimmt, woraus diverse Gefügeparameter abgeleitet werden können, wie Missorientierungen, oder Texturen, die Auswertung von Körnern und Grenzflächen oder die Untersuchung von Spannungszuständen [48]. Nachteile der EBSD-Messung gegenüber LM oder REM sind lange Messzeiten und die begrenzte Auflösung feiner Strukturen, wie die Zementitausscheidungen im sub- μm Bereich in Stahlgefügen.

In einem korrelativen Ansatz ist es möglich, über zusätzliche Methoden Erkenntnisse und Referenzen zu gewinnen und spätere Auswertungen auf eine einzige, im Idealfall die einfachste und schnellste, Methode zu reduzieren. Für die Korrelation ist es erforderlich, die auf unterschiedlichen Kontrastierungen und Abbildungsmethoden beruhenden Gefügaufnahmen zu registrieren. Unter Bild-Registrierung wird die „Überlagerung von Aufnahmen (zwei oder mehr) desselben Bereichs, die zu unterschiedlichen Zeitpunkten, aus unterschiedlichen Perspektiven und/oder mit unterschiedlichen Sensoren gemacht wurden“ [49] verstanden. Einfache Überlagerungen dieser Gefügaufnahmen rein durch rotatorische oder translatorische Anpassungen sind i.d.R. nicht möglich, da die der Bilderzeugung zugrunde liegende Physik bei den verschiedenen Methoden stark unterschiedlich sein kann (z.B. LM und EBSD) [50–53]. Aufnahmebedingungen im jeweiligen Mikroskop wie Neigungswinkel, Rotation oder Einbauhöhe der Probenoberfläche oder ggfs. Probendrift und Aufladungseffekte kommen erschwerend hinzu [50,51]. Die Fehlausrichtung wird tendenziell größer, je höher die Auflösung oder je größer der abgebildete Bereich ist [50]. Allgemein bestehen Registrierungsansätze aus einer Merkmalerkennung, einer Merkmalanpassung, einer Anpassung eines Transformationsmodells sowie der Skalierung und Transformation der Aufnahmen [49]. Während der Merkmalerkennung werden markante Merkmale wie Kanten, Konturen, Ecken oder sich kreuzende Linien erkannt. Bei der Merkmalanpassung wird die Übereinstimmung zwischen den im betrachteten Bild erkannten Merkmalen und den im Referenzbild erkannten Merkmalen ermittelt. Anschließend werden Parameter der sogenannten Mapping-Funktionen, die das betrachtete Bild und das Referenzbild aufeinander ausrichtet, bestimmt. Letztlich wird das betrachtete Bild basierend auf dieser Mapping-Funktion transformiert [49]. Jeder dieser Schritte hat seine eigenen spezifischen Herausforderungen [49]. Daher gibt es auch eine große Zahl an

Registrierungsansätzen [49,54–56], unter anderem getrieben durch Aufgabenstellungen aus Fernerkundung oder Biologie und Medizin [49,51,54].

Zur Registrierung von licht- und rasterelektronenmikroskopischen Gefügeaufnahmen etablierten Britz et al. [50] eine Kombination der SIFT Feature Extraction [57] und des bUnwarpJ Algorithmus [58] im open-source Bildverarbeitungsprogramm Fiji/ ImageJ [59]. Der Algorithmus der skaleninvarianten Merkmalstransformation (Scale-Invariant-Feature Transform, SIFT, [60]) dient dem Erkennen, Beschreiben und Anpassen lokaler Merkmale in Bildern. Damit werden in REM- und LM-Aufnahmen gemeinsame Merkmale identifiziert. Diese Merkmale sind invariant gegenüber der Skalierung und Rotation des Bildes und bieten in Bezug auf große Bereiche affiner Verzerrungen, Rauschen und Änderungen der Beleuchtung eine robuste Merkmalanpassung [60]. Für die Registrierung werden diese SIFT-Merkmale in den Algorithmus bUnwarpJ zur elastischen und konsistenten Bildregistrierung mit Hilfe sog. B-Splines, basierend auf [61,62], übernommen. Abbildung 2-7 visualisiert diesen Ablauf.

In der Gefügeanalyse von Stählen finden sich bereits einige korrelative Charakterisierungsansätze. Britz et al. [50] verwenden eine korrelative Charakterisierung aus LM und REM, bei dem die segmentierte LM-Aufnahme als Maske zur Definition von Zweitphasen-Objekten verwendet wird, um damit aus der REM-Aufnahme Gefügemerkmale zu extrahieren. In weiteren Arbeiten kombinierten Britz et al. LM und EBSD [45,63]. Dabei zeigten sie einerseits bei der Kontrastierung mittels modifizierter Beraha Ätzung den Zusammenhang zwischen der Färbung von Ferritkörnern und deren kristallographischer Orientierung [34]. Andererseits gelingt eine umfängliche Charakterisierung ferritischer und bainitischer Strukturen in Multiphasenstählen [63]. Pinard et al. [64] untersuchten Ferrit, Bainit und Martensit mittels einer Kombination aus EBSD und Elektronenstrahlmikroanalyse (electron probe microanalysis, EPMA). Diese korrelative Charakterisierung wird auch von Li et al. [65] zur Charakterisierung eines Multiphasenstahls mit Ferrit, Bainit und Martensit-Austenit-Partikeln angewandt. Eine Kombination von EBSD, EPMA und Nanohärte-Messungen werden von Rijkenberg et al. [66] sowie Ackermann et al. [67] verwendet. Erstere untersuchen Martensit, Restaustenit, Bainit und Ferrit in Dualphasen- und TRIP-Stählen. Letztere untersuchen und definieren unterschiedliche Bainit-Morphologien, die bei hohen, mittleren bzw. niedrigen Temperaturen gebildet wurden. EBSD und Nanoindentation werden ebenfalls von Dzaszyk et al. angewandt [68]. Na et al. [69] wenden korrelative Messungen aus EBSD und TEM an. Über die TEM-Referenzen ist es möglich, Grenzwerte zur Unterscheidung von Bainit und Martensit anhand der EBSD Image Quality (IQ) zu definieren. Auch Hofer et al. [70] nutzen TEM-Referenzen zur Validierung einer EBSD-basierten Unterscheidung von bainitischem Ferrit, Restaustenit und M/As in einem karbid-freien bainitischen Stahl.

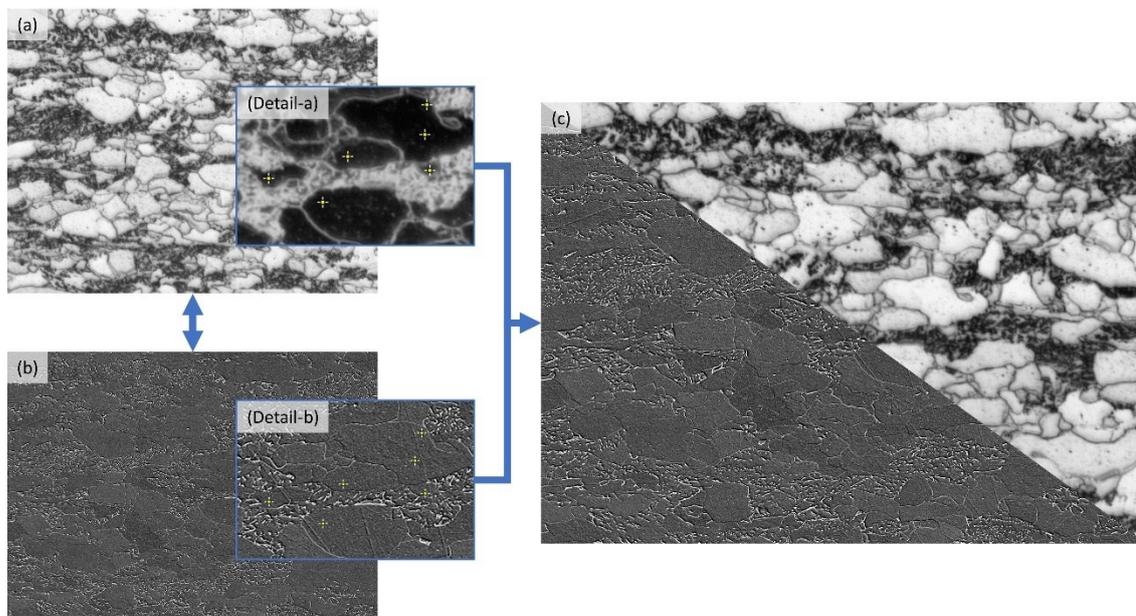


Abbildung 2-7: Visualisierung der Bildregistrierung einer korrelativen Charakterisierung. (a) Originale LM-Aufnahme. (Detail-a) Invertierte LM-Aufnahme mit gemeinsamen Merkmalen zur REM-Aufnahme nach Anwendung von SIFT. (b) Originale REM-Aufnahme. (Detail-b) REM-Aufnahme mit gemeinsamen Merkmalen zur LM-Aufnahme nach Anwendung von SIFT. (c) LM und REM-Aufnahme, überlagert, nach Registrierung mittels bUnwarpJ.

2.2.3 Segmentierung

Der grundlegende Schritt einer quantitativen Gefügeanalyse ist das Segmentieren der Mikroskop-Aufnahme zum Separieren verschiedener Gefügebestandteile. In der Bildbearbeitung ist die Segmentierung der Prozess der Aufteilung eines digitalen Bildes in mehrere Segmente. Die Vielfalt der stetig zunehmenden Segmentierungsansätze ist nur schwer zu überblicken. Grundsätzlich können Konzepte für die Segmentierung in pixelbasierte, kantenbasierte, modellbasierte und regionenbasierte Verfahren sowie Soft-Computing Ansätze eingeteilt werden [71], Abbildung 2-8.

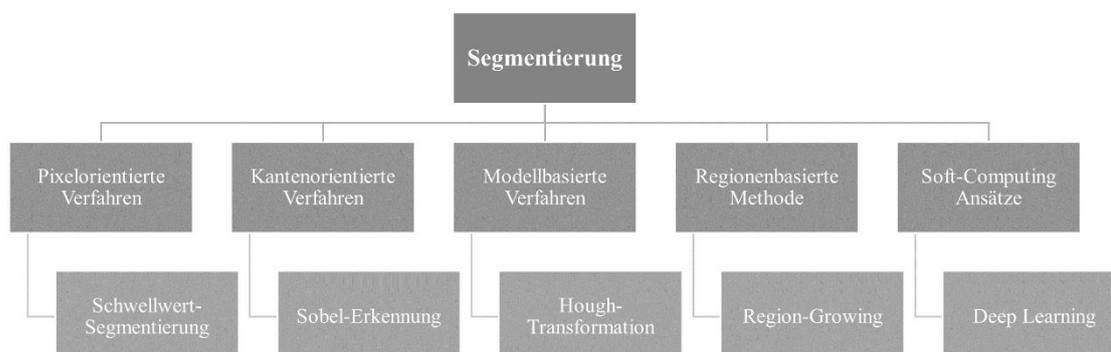


Abbildung 2-8: Übersicht verschiedener Segmentierungsansätze mit jeweils einer beispielhaften Methode, basierend auf [71].

Die Schwellwert-Segmentierung ist ein pixelbasiertes Verfahren und wohl weiterhin der in der Materialwissenschaft am weitesten verbreitete Segmentierungsansatz. Jeder Pixel wird einzeln betrachtet und seine Zugehörigkeit zu einem Segment durch den Vergleich des Grauwertes mit einem Schwellwert ermittelt. Das Verfahren ist schnell und einfach und liefert für Standardanwendungen zumeist ausreichende Ergebnisse. Voraussetzung dafür sind geringe Überlappungen der Gefügebestandteile in der Grauwertverteilung des Bildes, außerdem ist das Verfahren anfällig für Helligkeitsgradienten wie durch ein Shading. Dementsprechend werden einheitliche Schliffbilder benötigt. Es existieren diverse Ansätze zur Automatisierung und Optimierung der Schwellwert-Segmentierung [72], bspw. die automatische Einstellung des Schwellwerts gemäß Otsu [73] oder das Verwenden lokaler statt globaler Schwellwerte. Für weitere Auswertungen ist oft eine Nachbearbeitung über morphologische Binärbild-Operationen nötig, die allerdings einen großen Einfluss auf die später aus dem Binärbild bestimmten Parameter haben können.

Kantenorientierte Verfahren verwenden hauptsächlich die Grauwertänderung an Kanten [74]. Pixel, die nicht durch eine Kante getrennt werden, können demselben Segment zugeordnet werden [75]. Prominente Beispiele sind der Sobel Filter und der Canny Algorithmus [76,77]. Modellbasierte Verfahren können bei Objekten definierter Geometrie, die jedoch unvollständig sind, verwendet werden. Ein bekanntes Beispiel ist die Hough-Transformation [78], die gerade Linien sehr genau erkennen kann. Regionenbasierte Verfahren betrachten nicht einzelne Pixel, sondern verknüpfte Regionen [79]. Ein Beispiel ist das „Region Growing“, bei dem ein anfänglicher Satz kleiner Gebiete iterativ entsprechend einer Ähnlichkeitsbedingung zusammengeführt wird. Ausgehend von einem „seed point“ wird dieser anhand einer Ähnlichkeitsbedingung mit seinen Nachbarpixeln verglichen. Trifft die Bedingung zu, wird der Nachbarpixel zur Region ergänzt.

Soft-Computing kann als Sammelbegriff für approximative Lösungsverfahren verstanden werden, die sich von traditionellen, exakten numerischen Computer-Verfahren unterscheiden [80]. Methoden des maschinellen Lernens können dem ebenfalls zugeordnet werden [74]. Segmentierungen mit Hilfe von maschinellem Lernen werden in Kapitel 2.3.1 behandelt.

2.2.4 Methoden der Merkmals-Extraktion

Zur Quantifizierung des Gefüges ist es nötig, geeignete Merkmale aus den Gefügaufnahmen zu extrahieren. Grundlegende Merkmale von Gefügebestandteilen sind Größe und Form beschreibende Parameter [35]. Sie werden auch als **morphologische Parameter** bezeichnet. Üblicherweise werden sie nach der Segmentierung an einem Binärbild, in dem Vordergrundobjekte vom Hintergrund getrennt sind, bestimmt (Abbildung 2-9). Typische

Parameter sind Fläche, Umfang oder konvexer Umfang sowie formbeschreibende Größen wie maximaler Feret-Durchmesser, Rundheit oder das Aspektverhältnis. Für weitergehende Informationen wird auf etablierte Standardwerke referenziert [81,82].

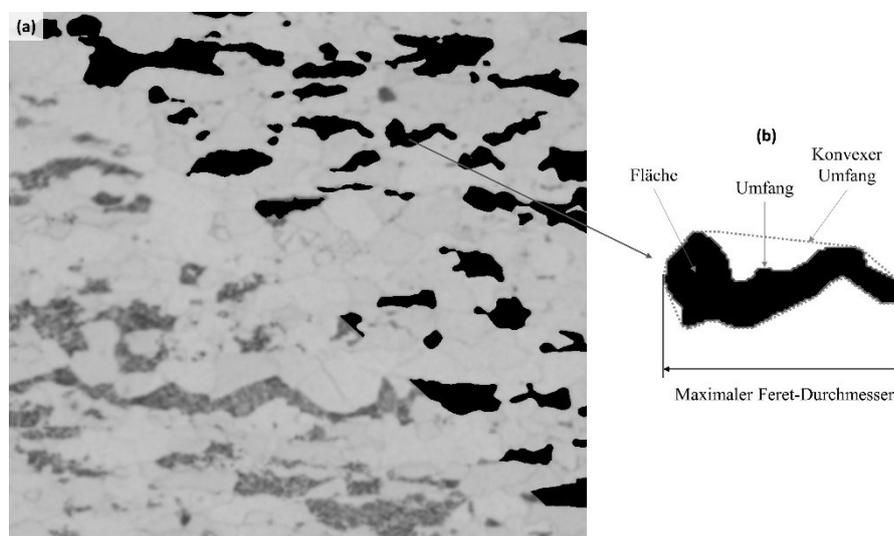


Abbildung 2-9: Visualisierung morphologischer Parameter. (a) linke Diagonale: Gefüge eines Zweiphasenstahls nach mod. Beraha Ätzung (Ferrit hell, C-reiche Zweitphase dunkel), rechte Diagonale: überlagertes Bild nach Schwellwert-Segmentierung. (b) Ausgewähltes Zweitphase Objekt nach Schwellwert-Segmentierung: Visualisierung morphologischer Parameter.

Nachteil der Binärbildauswertung ist, dass wertvolle Grauwertinformationen verloren gehen, die den Großteil der Informationen über die Gefüge-Substrukturen enthalten. Diese Informationen können über eine Auswertung der Bildtextur anhand von Graustufenbildern extrahiert werden. Unter **Bildtextur** versteht man die räumliche Verteilung und Variation der Grauwerte in einem Bild [83]. Wohingegen das Erkennen unterschiedlicher Texturen für das menschliche Sehsystem intuitiv erfolgt, ist das mathematische Erfassen der Bildtextur eine Herausforderung [71], weswegen es in der Literatur unterschiedliche Ansätze gibt.

Einfache Texturparameter sind Mittelwert und Varianz des Grauwertistogramms. Das Erkennen unterschiedlicher räumlicher Muster ist damit allerdings nicht möglich. Die von Haralick et al. [84] vorgeschlagenen **Haralick-Texturparameter** beruhen auf der sog. Grauwertematrix (engl. Gray-Level Co-Occurrence Matrix, GLCM). Die GLCM drückt aus, wie oft ein bestimmter Grauwert in einem bestimmten räumlichen Verhältnis zu einem anderen Grauwert im Bild erscheint [84]. Die Elemente dieser Matrix setzen sich aus der Anzahl von bestimmten Richtungs- und Distanzabhängigkeiten zwischen Grauwertpaaren zusammen [85]. Das Aufstellen der GLCM wird an einem vereinfachten Beispiel in Abbildung 2-10 gezeigt.

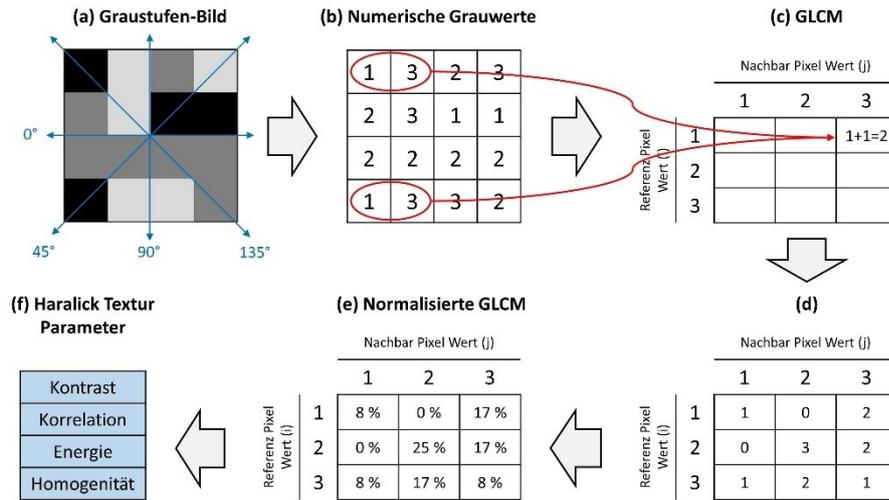


Abbildung 2-10: Schematische Darstellung der Berechnung der Gray-Level Co-Occurrence Matrix und Haralick Texturparameter: (a) vereinfachtes Graustufen-Bild mit drei Grauwerten. (b) numerische Darstellung: es wird gezählt, wie oft bestimmte Grauwert-Kombinationen nebeneinander liegen, hier die Grauwert-Kombination 1 neben 3, die zwei Mal vorliegt. (c) Diese Anzahl wird an die entsprechende Stelle der GLCM geschrieben. (d) dies wird für alle Grauwert-Kombinationen durchgeführt. Anschließend wird die GLCM normalisiert (e) und es können verschiedene Bildtexturparameter berechnet werden. Modifiziert nach [86].

Die GLCM kann für ein gesamtes Bild, jedoch auch für einzelne Objekte in einem Bild berechnet werden. Aus der GLCM können diverse Bildtexturparameter extrahiert werden. Die bekanntesten sind Kontrast, Korrelation, Energie und Homogenität. Der Kontrast ist ein Maß für die lokalen Variationen in der GLCM [84]. Die Korrelation ist ein Maß für den linearen Zusammenhang der Grauwerte untereinander [87]. Die Energie ist ein Maß für die Gleichmäßigkeit der Grauwertverteilung im Bild [88]. Die Homogenität berücksichtigt in erster Linie Eintragungen nahe der Diagonalen der GLCM und kann als Inverse des Kontrastes beschrieben werden [87]. Insgesamt können 19 Texturparameter berechnet werden. Da die GLCM abhängig von der betrachteten Richtung ist, wird sie im Ansatz von [84] unter Richtungen von 0°, 45°, 90°, und 135° berechnet und die daraus extrahierten Parameter gemittelt. Weibel et al. [85] schlugen vor, die GLCM unter Richtungen von 0-180° in 1° Schritten zu berechnen, um durch die geringere Schrittweite alle möglichen Extremwerte der GLCM erfassen zu können. Es werden ebenfalls Mittelwerte, aber auch die Amplitude (definiert als Maximum minus Minimum) der extrahierten Parameter bestimmt. Diese Amplitude zeigte sich als sehr gut geeignet, auch geringe Unterschiede in der Bildtextur von Gefügen zu erfassen [85]. Durch die Bestimmung von Mittelwerten und Amplituden ergeben sich insgesamt 38 Haralick-Merkmale. Eine Auflistung befindet sich im Anhang (10.6).

Eine weitere Gruppe der Texturparameter sind die **Local Binary Pattern (LBP)** [89]. Ein LBP kodiert den benachbarten Kontext jedes Pixels in ein Histogramm des gesamten Bildes, das als

finaler Merkmalsvektor des Bildes verwendet wird. Die Berechnung wird an einem Beispiel in Abbildung 2-11 gezeigt.

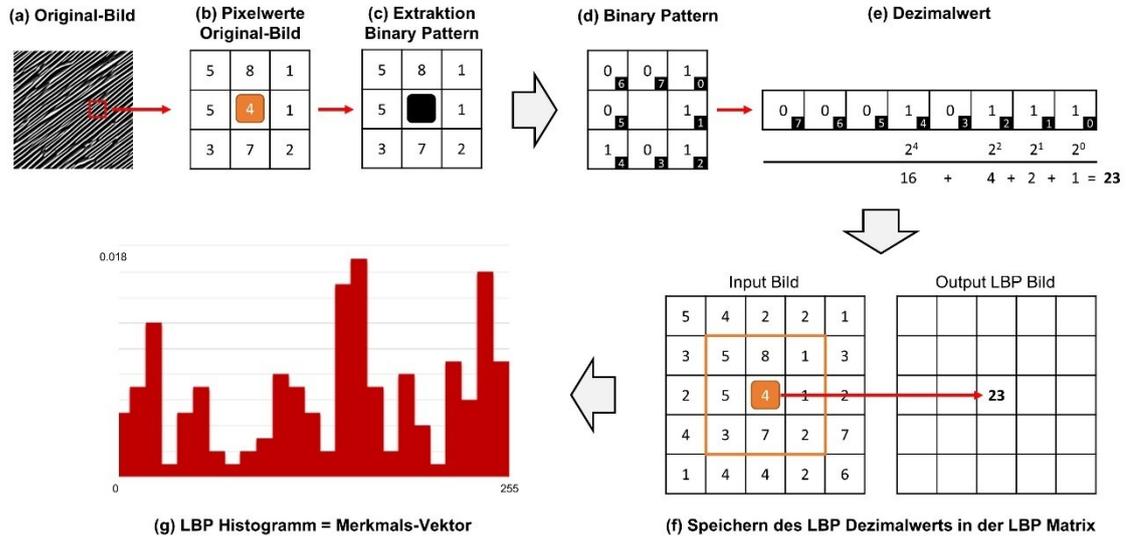


Abbildung 2-11: Schematische Darstellung der Berechnung des Local Binary Pattern: (a), (b) originales Grauwert-Bild, in dem ein Pixel und seine acht umliegenden Nachbarpixel betrachtet werden. (c) zur Berechnung des LBP werden die Werte der Nachbarpixel mit dem Wert des zentralen Pixels verglichen. (d) Ist der Wert größer wird an die Stelle des Nachbarpixels eine Null geschrieben, ist er kleiner, dann eine Eins. (e) diese Folge von Nullen und Einsen wird als Binär-Zahlencode aufgeschrieben, der dann wiederum in eine Dezimalzahl umgerechnet wird. (f) Dieser Dezimalwert wird anschließend in der LBP-Matrix an die entsprechende Stelle des betrachteten zentralen Pixels geschrieben. Diese Berechnung erfolgt für jeden Pixel im Original-Bild. (g) als Ergebnis kann die LBP-Matrix als Histogramm dargestellt werden. Modifiziert nach [90].

Kennwerte der Nachbarschaft sind die Anzahl berücksichtigter Nachbarpixel N sowie der Radius R um den zentralen Pixel. Per Definition, durch das binäre Kodieren, sind LBP graustufeninvariant. Durch die Berücksichtigung einer kreisförmigen Nachbarschaft anstelle eines Quadrats werden LBP-Merkmale zusätzlich auch rotationsinvariant. Aufgrund der üblicherweise kleinen berücksichtigten Nachbarschaften können LBP-Merkmale gut feine Details in Strukturen erkennen, haben aber gleichzeitig Schwierigkeiten, globalere Charakteristika zu erfassen [90]. Daher führten Mäenpää et al. [91] sog. Multiscale LBP ein. Dort werden LBP für verschiedene Kombinationen aus R und N berechnet, deren Merkmalsvektoren zu einem einzelnen Vektor aneinandergereiht werden.

Die Verwendung von Bildtexturparametern zur Gefügequantifizierung und Unterscheidung unterschiedlicher Gefügearten ist inzwischen weit verbreitet, oft auch in Kombination mit Methoden des maschinellen Lernens. Gola et al. [92] unterscheiden die C-reiche Zweitphase von Zweiphasenstählen in Perlit, Bainit und Martensit, Webel et al. [85] trennen Perlit, unteren Bainit und Martensit. Andere Arbeiten unterscheiden Ferrit-Perlit Gefüge von martensitischen Gefügen

mit Restaustenit [93] oder bainitische, martensitische und bainitisch-martensitische Gefüge [94]. Liu et al. [95] verwenden sie zur Quantifizierung perlitischer Stähle sowie Multiphasenstähle.

2.3 Künstliche Intelligenz & Maschinelles Lernen

Künstliche Intelligenz (KI) und maschinelles Lernen (ML) sind rasant wachsende Gebiete, die nahezu alle technologischen Aspekte der Gesellschaft betreffen und transformative Auswirkungen haben können [96]. Durch generative Sprachmodelle (Chatbot ChatGPT [97]) oder Bildgeneratoren (z.B. DALL-E 2 [98]) sind sie kürzlich auch verstärkt in den Fokus der breiten Öffentlichkeit gelangt. Im Bereich der Bildverarbeitung, wozu auch die Aufgaben Gefügesegmentierung und -klassifizierung zählen, sind u.a. das autonome Fahren oder biomedizinische Anwendungen als treibende Kräfte für die Entwicklung und Verbreitung von KI- und ML-Methoden zu nennen, da sie konventionelle Ansätze dort schnell übertrafen [99–101].

Gefügeklassifizierungen werden noch immer oft rein subjektiv von Experten vorgenommen. KI- und ML-Methoden eröffnen hier neue, bessere Möglichkeiten. Eine wesentliche Bedeutung von KI und ML liegt darin, dass sie Probleme der automatisierten Verarbeitung durch Computer zugänglich machen, bei denen eine umfassende mathematische Modellierung nicht möglich ist. In der Tat lassen sich viele menschliche Aufgaben nicht adäquat mit einer einfachen deterministischen, regelbasierten Lösung lösen [102]. Darüber hinaus sind KI und ML gut zur Bewältigung großer Datenmengen geeignet.

Da bereits der Begriff „Intelligenz“ schwer zu definieren ist, gibt es auch keine allgemein akzeptierte Definition des Begriffes „künstliche Intelligenz“ oder weiterer damit assoziierter Ausdrücke. Darüber hinaus werden Schlagworte aus diesem Feld oft in unklarer oder inkonsistenter Weise benutzt. Daher ist es wichtig, die grundlegende Terminologie zu Beginn dieses Kapitels so klar und konkret wie möglich zu formulieren. **Künstliche Intelligenz (KI)** wird einerseits als Teilgebiet und Forschungsfeld der Informatik gesehen, welches versucht, „mit Hilfe von Algorithmen kognitive Fähigkeiten wie Lernen, Planen oder Problemlösen zu realisieren“ [103]. Das Buch „Artificial Intelligence: A Modern Approach“ von Russel & Norvig wird als internationales KI-Standardlehrbuch angesehen und behandelt die folgenden Forschungsfelder [104]: Problemlösen – Wissensrepräsentation und Schlussfolgern – Unsicherheit und Schlussfolgern – Maschinelles Lernen – Wahrnehmung und Sehen – Verstehen und Generieren von natürlicher Sprache – Interaktion – Robotik. Andererseits steht KI auch für Systeme, die „ein Verhalten zeigen, für das gemeinhin menschliche Intelligenz vorausgesetzt wird“ [103]. Dabei liegt der Fokus gemäß [104] auf rationalem Handeln. Diese KI-Systeme sollen „autonom agieren,

ihre Umwelt wahrnehmen, über einen längeren Zeitraum bestehen bleiben, sich an Veränderungen anpassen und Ziele setzen und verfolgen“ [104]. Sie sollen so handeln, dass das beste Ergebnis oder bei Ungewissheit das beste erwartbare Ergebnis erzielt wird [104].

Maschinelles Lernen (ML) ist ein Teilgebiet und eine grundlegende Methode der KI. Dabei werden Computer in die Lage versetzt, selbstständig Muster und Regelmäßigkeiten aus verfügbaren Daten zu lernen, ohne dass sie speziell für diese Aufgabe programmiert wurden. Nach Abschluss dieser Trainingsphase kann das Gelernte verallgemeinert, d.h. auf neue Daten angewendet werden. Drei Arten des ML werden unterschieden: überwachtes Lernen (engl. supervised learning, Kapitel 2.3.1), unüberwachtes Lernen (engl. unsupervised learning, Kapitel 2.3.2) und verstärkendes Lernen (engl. reinforcement learning). Beim überwachten ML erhält der Algorithmus einen Satz an Daten und zugehörigen zu erwartenden Ergebnissen, und lernt daraus eine Funktion, die die Eingabedaten auf die Ausgabe abbildet [105]. Beim unüberwachten ML werden Muster in den Eingabedaten erlernt, ohne dass weitere Erläuterungen vorgegeben werden [106]. Beim verstärkenden ML wird der Lernalgorithmus über Feedback trainiert. Für erfolgreiche Handlungen wird der Algorithmus belohnt, für fehlerhafte bestraft [107].

Data Science umfasst grob alle Schritte, um Bedeutung und Wissen aus Daten zu generieren: die Datenerhebung, die Datenaufbereitung, die Modellbildung, wozu auch ML-Methoden zum Einsatz kommen können, und die letztliche Anwendung der Modelle [103]. **Data Mining** steht für den Einsatz von Methoden der Statistik oder des maschinellen Lernens, um interessante Zusammenhänge oder Wissen in großen Datenmengen aufzuspüren [103,108].

Hauptanwendungsgebiete der KI- und ML-Methoden, bereits in Bezug auf materialwissenschaftliche Fragestellungen, sind Klassifizierung, Regression und Segmentierung. Aufgabe der **Klassifizierung** ist die Vorhersage eines diskreten Labels, d.h. aus der Eingabe (Bilder oder Daten) wird bspw. eine bestimmte Klasse oder ein bestimmtes Ereignis vorhergesagt. Im Gegensatz dazu wird bei der **Regression** eine kontinuierliche Größe vorhergesagt, d.h. aus der Eingabe (Bilder oder Daten) wird bspw. ein bestimmter Festigkeitswert bestimmt. Die **Segmentierung** wiederum betrifft Bilder und bedeutet die Aufteilung eines digitalen Bildes in mehrere Segmente. Fragestellungen, die die Bildverarbeitung betreffen, erfordern noch sorgfältigere, detaillierte Abgrenzungen, siehe Abbildung 2-12.

Bei der semantischen Segmentierung wird jeder Pixel des Bildes einer bestimmten Klasse zugeordnet. Separate Objekte derselben Klasse werden nicht unterschieden. Die Klassifizierung bezieht sich auf das gesamte Bild, welches lediglich ein Objekt enthält. Dieses Bild wird einer bestimmten Klasse zugeordnet. Dieses Objekt kann im Bild zusätzlich lokalisiert werden. Mehrere Objekte in einem Bild können mittels Objekt-Detektion gekennzeichnet werden, wobei

die Kennzeichnung durch eine sog. Bounding Box erfolgt. Bei der Instanz-Segmentierung wird zusätzlich auch jeder Pixel der separaten Objekte segmentiert.

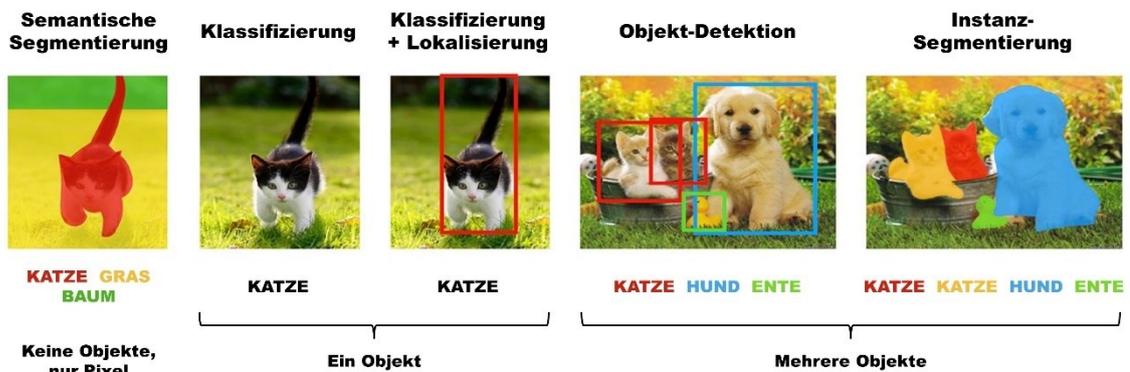


Abbildung 2-12: Fragestellungen für das ML in der Bildverarbeitung, modifiziert nach [109].

Die Basis für all diese datengetriebenen Methoden ist die Verfügbarkeit ausreichend großer Datenmengen. Entscheidende Grundlage für Verbreitung und Erfolg von KI- und ML-Methoden waren dementsprechend, dass immer mehr große Datenmengen generiert wurden, in Kombination mit Fortschritten in Datenspeicherinfrastruktur und Rechenpower, sowie das Wiederentdecken der bereits seit Jahrzehnten bekannten künstlichen neuronalen Netze [104,110]. So kann argumentiert werden, dass der ehemalige KI-Flaschenhals – das Problem, wie das gesamte Wissen, das ein System benötigt, ausgedrückt werden kann – in vielen Anwendungen durch Lernmethoden statt durch „handkodierte Knowledge-Engineering“ gelöst werden kann, vorausgesetzt, die Lernalgorithmen verfügen über eine ausreichend große Datenbasis [104]. Als Beispiele, bei denen KI- und ML-Methoden konventionelle Herangehensweisen und teilweise auch die menschliche Leistungsfähigkeit übertrafen, sind u.a. das autonome Fahren, medizinische Bildauswertung und Diagnostik, die perfekte Beherrschung des Spiels Go oder die Bild- und Objekterkennung [111] zu nennen. Trotz aller Fortschritte gilt jedoch nach wie vor, dass ein ML-Modell nur so gut sein kann wie die Daten, mit denen es erstellt wurde [110].

2.3.1 Überwachtes maschinelles Lernen

Beim überwachten ML erhält der Algorithmus einen Satz an Daten und zugehörigen zu erwartenden Ergebnissen und lernt daraus eine Funktion, die die Eingabedaten auf die Ausgabe abbildet. Die Zuordnung dieser sog. **Grundwahrheit**, also die Verknüpfung der Daten mit den zugehörigen zu erwartenden Ergebnissen durch einen menschlichen Experten, ist ein entscheidender Schritt des überwachten maschinellen Lernens. Synonym für die Zuordnung der Grundwahrheit werden oft die Begriffe „labeln“ und „annotieren“ verwendet. Als Trainingsdaten

(auch: gelabelte/ annotierte Daten) können die vorliegenden erhobenen Daten inklusive der zugeordneten Grundwahrheit verstanden werden. Der Prozess zur Generierung von Trainingsdaten kann zeit- und kostenintensiv sein. Es muss sorgfältig darauf geachtet werden, dass ausreichend Trainingsdaten vorhanden sind und sie das gesamte Spektrum der erwarteten Eingaben und gewünschten Ergebnisse abdecken [110]. Außerdem muss darauf geachtet werden, dass in die Zuordnung der Grundwahrheit das jeweils benötigte Domänenwissen einfließt, damit sie so objektiv und reproduzierbar wie möglich erfolgt. Generell gilt, dass das spätere ML-Modell nur so gut sein kann, wie die zugrunde liegende Datenbasis.

Beim anschließenden Trainingsprozess wird ein Klassifikator trainiert. Ganz allgemein ist ein Klassifikator ein Verfahren, das einen Satz von Merkmalen erhält und eine Klassenbezeichnung für diese Merkmale erzeugt [112]. Das Training besteht daraus, den bestmöglichen Klassifikator zu finden, der für ein gegebenes Problem die Input-Daten auf die Output-Daten abbildet [113]. Das geschieht in der Regel, indem der Algorithmus eine Reihe von gekennzeichneten Trainingsbeispielen erhält und dann nach einem Klassifikator gesucht wird, der eine Kostenfunktion optimiert, die anhand der Trainingsdaten bewertet wird [112]. Dafür steht eine Vielzahl an ML-Algorithmen zur Verfügung, die den mathematischen Rahmen für den Lernprozess bereitstellen. Die Parameter, die das Verhalten eines ML-Algorithmus steuern, werden als Hyperparameter bezeichnet. Je nach Wahl der Hyperparameter können stark unterschiedliche Ergebnisse resultieren. Durch ein Anpassen und Optimieren der Hyperparameter können üblicherweise bessere Ergebnisse erzielt werden [114]. Ein fertig trainierter Klassifikator wird oft als Modell bezeichnet. Ziel ist es, ein Modell zu erhalten, das auch bei Daten, die zum Zeitpunkt des Trainings noch nicht bekannt sind, gute Ergebnisse erzielt [110,112,113]. Dies wird als Generalisierung bezeichnet [112]. Um dies zu beurteilen, und um passende ML-Algorithmen sowie Hyperparameter auszuwählen, ist eine Modellvalidierung notwendig. Die Modellvalidierung ist ein fundamentales Verfahren im maschinellen Lernen. Ohne Modellvalidierung ist es leicht möglich, dass das Modell so lange optimiert wird, bis es zum sog. Überanpassen (engl. overfitting) kommt. In diesem Fall ist das Modell unnötig komplex und kann mit neuen Daten nicht mehr gut umgehen [112,114].

Daher werden die gelabelten Ausgangsdaten vor Beginn des Trainings in einen Trainingssatz, einen Validierungssatz und einen Testsatz aufgeteilt. Der Trainingssatz dient der Modellerzeugung. Der Validierungssatz wird zur Bewertung der Leistung des Modells zur Optimierung der Hyperparameter des Modells verwendet [114]. Da der Validierungssatz auch dem iterativen Anpassen der Hyperparameter dient, wirkt er sich indirekt auf das Modell aus [114]. Der Testsatz wird zur unvoreingenommenen Bewertung des finalen Modells genutzt. Er

wird erst verwendet, wenn das Modell vollständig trainiert ist, hat keinen Einfluss auf das Modell und dient lediglich zur Bestimmung der Leistung [114].

Das geeignete Aufteilen des Datensatzes in Trainings- und Validierungssatz, um den Trainingsprozess zu optimieren, aber gleichzeitig eine Überanpassung zu vermeiden, ist nicht trivial. Dazu kann die k-fache Kreuzvalidierung (engl. cross-validation), eine weit verbreitete Vorgehensweise zur Bestimmung der Leistung eines Modells, zum Einsatz kommen. Dabei werden die Daten gleichmäßig und nach dem Zufallsprinzip in einen Trainings- und einen Validierungssatz aufgeteilt, ein Modell mit dem Trainingsatz trainiert und auf dem Validierungssatz evaluiert. Dieser Vorgang wird k-mal wiederholt und der Fehler über alle k Aufteilungen gemittelt [112,114].

Zur Beurteilung der Leistung eines Modells steht eine Vielzahl an Metriken zur Verfügung. Einfachste Metriken sind die absolute Fehlerrate (engl. error rate, prozentualer Anteil falscher Vorhersagen) und die Genauigkeit (engl. accuracy, prozentualer Anteil korrekter Vorhersagen) [112,115]. Für viele Klassifizierungen ist diese einfache Betrachtung nicht ausreichend, da Unterschiede zwischen einzelnen Klassen nicht berücksichtigt werden. Eine detaillierte Evaluierung unter Berücksichtigung der einzelnen Klassen erlaubt hingegen die Konfusionsmatrix (engl. confusion matrix). Die Zeilen der Matrix stellen die Grundwahrheit dar, die Spalten die Vorhersage des Modells, siehe Tabelle 2-5.

Tabelle 2-5: Schematische Konfusionsmatrix.

		Modell-Vorhersage	
		Positive Klasse	Negative Klasse
Grundwahrheit	Positive Klasse (P)	Richtig positiv (RP)	Falsch negativ (FN)
	Negative Klasse (N)	Falsch positiv (FP)	Richtig negativ (RN)

Aus der Konfusionsmatrix werden oft weitere Metriken abgeleitet. Die Präzision (engl. precision) gibt die Anzahl der korrekt klassifizierten Beispiele einer Klasse an, in Bezug auf alle Beispiele, die vom Modell dieser Klasse zugeteilt wurden ($precision = \frac{RP}{RP+FP}$) [116]. Die Sensitivität (engl. recall) gibt die Anzahl der korrekt klassifizierten Beispiele einer Klasse an, in Bezug auf alle Beispiele dieser Klasse im Datensatz ($recall = \frac{RP}{RP+FN}$) [116]. Der F1-Score kann als harmonisches Mittel aus Precision und Recall interpretiert werden und dient in erster Linie dazu, Precision und Recall in einer Zahl zusammenzufassen ($F1 = 2 \frac{precision \cdot recall}{precision+recall}$) [115,116].

Bei unausgewogenen Klassen sind globale Metriken wie die Genauigkeit nicht ausreichend, stattdessen ist eine differenzierte Evaluierung anhand der Konfusionsmatrix und daraus abgeleiteter Parameter unabdingbar. Bei Segmentierungsaufgaben (semantische Segmentierung)

sind die Klassen oft unausgewogen. Daher ist auch dort die Betrachtung der Pixel-Genauigkeit nicht immer zielführend. Eine verbreitete Metrik ist die Intersection over Union (IoU), auch bekannt als Jaccard Index. IoU misst das Verhältnis zwischen Schnittmenge und Vereinigung von vorhergesagten und annotierten Pixelflächen. Im Vergleich zur Pixel-Genauigkeit ist die IoU ein eher konservatives Maß, das niedrigere Werte erreicht. Das Erzeugen eines guten Modells erfordert i.d.R. mehrere Iterationen aus Auswahl des ML-Algorithmus, Training, Optimierung der Hyperparameter und Modellvalidierung und -interpretation. Das fertige Modell kann schließlich auf neue, ungesehene Daten angewendet werden.

Für die praktische Anwendung ist eine Unterteilung des überwachten ML in „konventionelles“ ML und Deep Learning relevant. Beim „konventionellen“ ML erfolgt die Merkmalsextraktion durch einen menschlichen Experten, als separater Schritt vor der Klassifizierung. Dahingegen erfolgen beim Deep Learning sowohl die Merkmalsextraktion als auch die Klassifizierung durch das künstliche neuronale Netz (Abbildung 2-13).

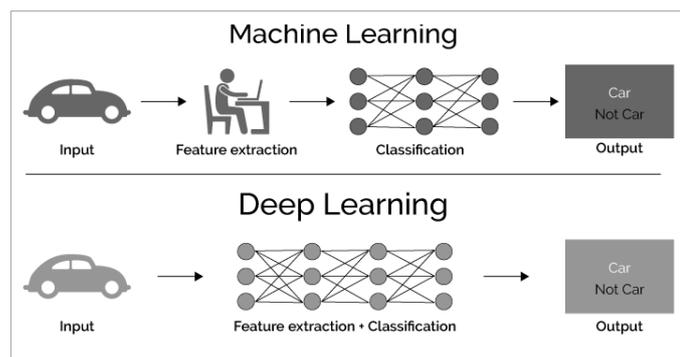


Abbildung 2-13: Unterscheidung zwischen konventionellem ML und DL, modifiziert nach [117].

2.3.1.1 Konventionelles maschinelles Lernen

Zum Klassifizieren steht eine Vielzahl an ML-Algorithmen, basierend auf verschiedensten Ansätzen, zur Verfügung. Den einen besten Algorithmus gibt es nicht, und zur Auswahl des passenden Algorithmus gehört auch für Experten weiterhin Trial-and-Error dazu [118]. Das **Stützvektorverfahren** (engl. **support vector machine**, SVM) klassifiziert Daten (n -dimensional), indem es die beste Hyperebene ($(n-1)$ -dimensional) findet, die die Datenpunkte einer Klasse von den Datenpunkten einer anderen Klasse trennt (Abbildung 2-14a) [107,119,120]. Als beste Hyperebene wird diejenige mit dem größten Abstand zwischen den beiden Klassen definiert. Unter den Stützvektoren werden die Datenpunkte verstanden, die die trennende Hyperebene aufspannen. In der Regel wird eine „soft-margin“ Hyperebene verwendet, um gewisse Fehlklassifizierungen zu tolerieren. Bei vielen realen Klassifikationsproblemen ist eine lineare Trennung der Daten nicht

möglich. In diesem Fall kommt der sog. Kernel Trick zum Einsatz. Kernel-Funktionen bilden die Daten auf einen anderen, meistens höherdimensionalen Raum ab, in welchem es möglich ist, die Daten wieder linear zu trennen (Abbildung 2-14b). Bei den Kernel-Funktionen kann es sich um Polynome, sigmoidale Funktionen oder die „Radial Basis Function“ handeln. Der reguläre SVM-Algorithmus ist für binäre Klassifizierungsprobleme formuliert. Daher wird die Klassifizierung mehrerer Klassen i.d.R. auf eine Reihe von binären Klassifizierungen reduziert.

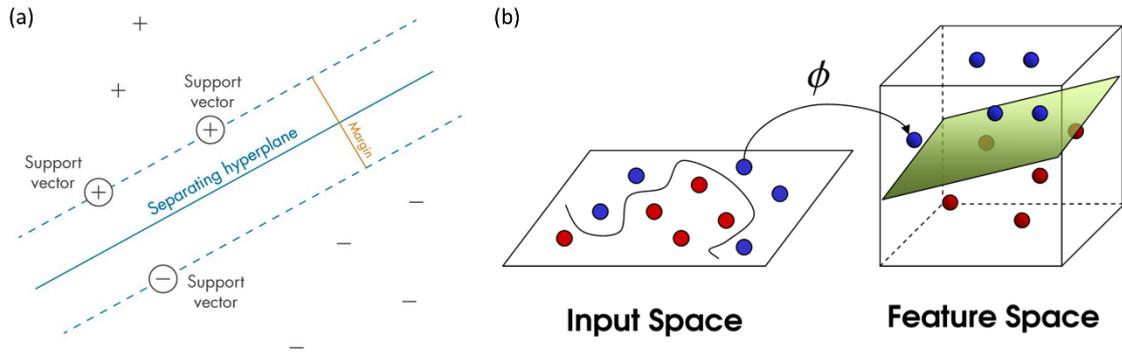


Abbildung 2-14: (a) Trennung der Datenpunkte in einer SVM mittels Hyperebene, nach [119]. (b) Kernel Trick der SVM, nach [121].

Entscheidungsbäume (engl. **decision trees**, DT) sind baumartige Diagramme zur Entscheidungsfindung. Sie bestehen aus Wurzelknoten, Entscheidungsknoten, Ästen und Blättern (Abbildung 2-15). Zur Vorhersage einer Antwort wird dem Entscheidungsbaum vom Wurzelknoten über Äste und Entscheidungsknoten bis hinunter zu einem Blatt gefolgt, welches das Klassifizierungsergebnis enthält. Dieser Weg steht für die verwendete Klassifizierungsregel [107,110].

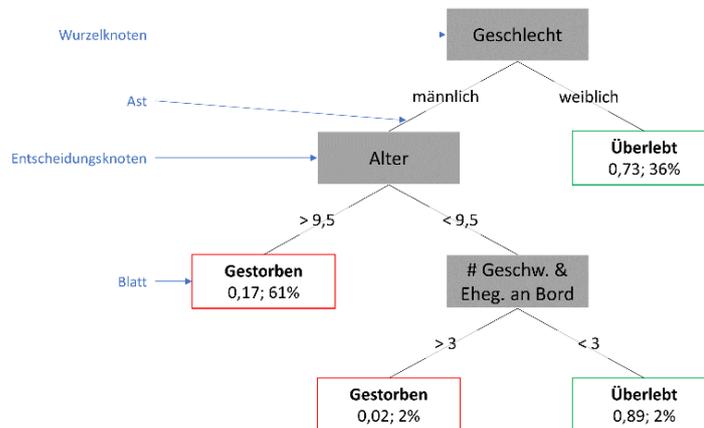


Abbildung 2-15: Schema eines Entscheidungsbaums, am Beispiel der Überlebenswahrscheinlichkeit von Reisenden auf der Titanic, modifiziert gemäß [122].

DT sind schnell und einfach anzuwenden, können visualisiert und interpretiert werden. Allerdings ist es möglich, dass beim Lernprozess komplexe Entscheidungsbäume entstehen, die schlecht generalisieren. Außerdem können sie instabil sein, da kleine Abweichungen in den Daten zu einem völlig anderen Baum führen können [107,123]. Mit den Techniken des „Bagging“ und „Boosting“ und dadurch der Kombination mehrerer DT in einem „ensemble classifier“ sind jedoch Verbesserungen möglich [105]. Ein **Random Forest** (RF) besteht aus einer Reihe von DT, die mit der Bagging Methode trainiert werden [107]. Bagging (Abkürzung für “Bootstrap Aggregation”) bedeutet, dass verschiedene Modelle anhand einer Datenteilmenge trainiert werden [107]. Die Ergebnisse dieser zufälligen, leicht unterschiedlichen DT werden am Ende über einen Mehrheitsentscheid zum Klassifizierungsergebnis des RF kombiniert. Beim **Boosted Trees** Algorithmus werden ebenfalls mehrere DT kombiniert. Im Gegensatz zum Bagging, bei dem die DT unabhängig voneinander sind und die Ergebnisse am Ende kombiniert werden, werden beim Boosting DT sequentiell generiert unter Berücksichtigung der Fehler des vorherigen DT [107]. Beiden Ansätzen gemein ist das Vereinen mehrerer schwacher Klassifikatoren zu einem starken Klassifikator, wodurch die Vorhersagegenauigkeit verbessert wird.

Bei vielen Anwendungen steht eine große Anzahl von Merkmalen zur Verfügung. Dies geht einher mit einer Paradigmenverschiebung bei der Entwicklung von Algorithmen [105]. Während früher der Fokus darauf lag, bereits vor dem Modelltraining wesentliche Merkmale zu identifizieren (Anzahl Trainingsdaten \gg Anzahl Merkmale), sind die Merkmalsvektoren heutzutage deutlich höherdimensionaler. Eine Vorauswahl über Expertenwissen findet entweder nicht mehr statt oder ist nicht ausreichend zur Reduktion. Dementsprechend ist nicht jedes Merkmal wichtig für die Klassifizierung [105]. Dies ist auch als „Fluch der hohen Dimensionalität“ (engl. curse of dimensionality) bekannt [107]. Eine große Anzahl an Merkmalen kann nicht nur den Trainingsprozess verlangsamen, sondern auch die Gefahr der Überanpassung erhöhen. Daher kommen i.d.R. Algorithmen zur Merkmalsauswahl zum Einsatz. Sie suchen nach einer Teilmenge von Merkmalen, die die Antwortvariable bestmöglich beschreiben. Der Hauptnutzen der Merkmalsauswahl besteht darin, die Modellleistung zu verbessern, eine effiziente Vorhersage zu ermöglichen und ein besseres Verständnis des Datenerzeugungsprozesses zu erreichen [124,125]. Die Algorithmen zur Merkmalsauswahl können in Filter-Methoden, Hüll-Methoden (engl. wrapper) und integrierte Methoden (engl. embedded) unterteilt werden [124,125]. Die passende Methode hängt ab von der Fragestellung (z.B. Klassifizierung oder Regression) und dem Datenformat (z.B. kontinuierlich oder kategorisch) und kann nicht pauschal angegeben werden. Übersichten über die Vielzahl der zur Verfügung stehenden Methoden finden sich in [124,125]. Geeignete Merkmale zu identifizieren

und daraus wiederum die relevantesten Merkmale auszuwählen, wird oft als Feature Engineering bezeichnet. Dafür wird i.d.R. die jeweilige Domänenexpertise benötigt.

2.3.1.2 Deep Learning

Deep Learning (DL) ist eine Methode des maschinellen Lernens unter Einsatz sog. künstlicher neuronaler Netze (engl. artificial neural network, ANN). Wesentlicher Unterschied zum „konventionellen“ ML ist, dass ANN sowohl die Merkmalsextraktion als auch die Klassifizierung erlernen. ANN sind dem Mechanismus des Lernens in biologischen Organismen nachempfunden [126]. Sie bestehen aus mehreren Schichten: einer Eingabeschicht, einer Ausgabeschicht und mehr als einer „versteckten“ Zwischenschicht (engl. hidden layer) [103,112,126]. Die erste Schicht nimmt Eingaben entgegen. Die Zwischenschichten enthalten Berechnungseinheiten, die als Neuronen bezeichnet werden [126]. Die letzte Schicht fungiert als Klassifikator [112]. Der Output einer Schicht ist mit dem Input der nächsten Schicht verbunden. Jeder Verbindung sind ein Gewicht und ein Grenzwert zugeordnet. Liegt der Output über dem festgelegten Grenzwert, wird diese Verbindung aktiviert und sendet Daten an die nächste Schicht des Netzes. Andernfalls werden keine Daten an die nächste Schicht des Netzes übergeben [127]. Die Zwischenschichten bilden ihre Eingaben jeweils in Merkmale ab, die für die nächste Schicht nützlich sind [112]. Auf diese Weise lernt das Netz Merkmale, die die letzte Klassifizierungsschicht für nützlich hält. Dies bringt den Vorteil, dass kein manuelles Feature Engineering notwendig ist, sondern dass das ANN so trainiert wird, dass es selbstständig starke Merkmale bildet [112]. Das Lernen erfolgt durch Änderung der Gewichte, die die Neuronen verbinden. Die Trainingsdaten, also Input-Output-Paare, geben Rückmeldung über die Korrektheit der Gewichte im neuronalen Netz, je nachdem, wie gut der vorhergesagte Output ist. Durch eine sukzessive Anpassung der Gewichte zwischen den Neuronen wird die vom neuronalen Netz berechnete Funktion, die Input auf Output abbildet, kontinuierlich verfeinert, bis sie genaue Vorhersagen liefert [126]. Je tiefer das Netz, also je mehr Zwischenschichten oder Neuronen es gibt, desto höher ist der mögliche Abstraktionsgrad und desto komplexere Sachverhalte können erlernt werden [103]. Typischerweise benötigen ANN viele Trainingsdaten.

Ein Sonderfall der ANN sind die faltungsbasierten neuronalen Netze (engl. **convolutional neural network**, CNN), die insbesondere bei der Verarbeitung von Bildern, Sprache und Audiosignalen herausragende Leistungen erbringen [126,127]. CNN sind definiert als ANN mit Faltungsoperationen in mind. einer Schicht [126]. Sie bestehen üblicherweise aus Convolutional Layer, Nichtlinearität, Pooling Layer und Fully Connected Layer. Die Convolutional Layer sind die zentralen Bausteine eines CNN, da dort die Merkmale erkannt und extrahiert werden. Das

geschieht über eine Aneinanderreihung von üblichen Filteroperationen. Der Output dieser Filteroperationen ist eine Merkmalskarte. Damit auch nicht-lineare Zusammenhänge erlernt werden können, wird nach jeder Faltungsoperation eine Nichtlinearität (z.B. Rectified Linear Unit, ReLU) auf die Merkmalskarte angewendet [126,127]. Im Pooling Layer wird die Auflösung der erkannten Merkmale verdichtet und reduziert, bspw. über Maximal-Pooling oder Mittelwert-Pooling. Dadurch werden überflüssige Informationen entfernt und die Datenmenge reduziert. In der Regel enthalten CNN wiederholte Abfolgen von Convolutional Layer und Pooling Layer. Convolutional Layer und Pooling Layer sind nicht vollständig vernetzt, wodurch die Anzahl an Verbindungen in diesen Schichten selbst bei großen Eingabemengen begrenzt und in einem beherrschbaren Rahmen bleibt, wodurch auch der Trainingsprozess erleichtert wird. Am Ende des CNN steht der Fully Connected Layer, der die Klassifizierung auf Grundlage der in den vorherigen Schichten extrahierten Merkmale vornimmt.

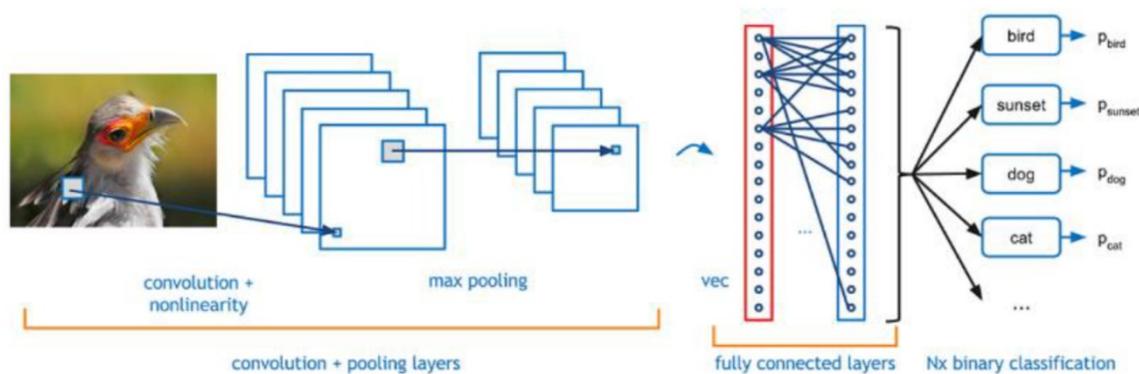


Abbildung 2-16: Schema eines CNN, nach [128]

CNNs können sowohl „low-level features“, die z.B. Ecken, Kanten oder einfachen Texturen, als auch „high-level features“ wie komplexe Muster oder bestimmte Bereiche von Objekten erlernen [126,128].

In der Bildverarbeitung stehen verschiedene CNN-Architekturen zur Klassifizierung, Objektdetektion oder semantischen Segmentierung zur Verfügung. CNN zur Klassifizierung sind wie bereits beschrieben aufgebaut. Dort wird das Bild letztlich auf einen eindimensionalen Merkmalsvektor reduziert, der zur Klassifizierung verwendet wird (Abbildung 2-17a). Populäre Architekturen sind VGG16, InceptionNet, ResNet oder DenseNet.

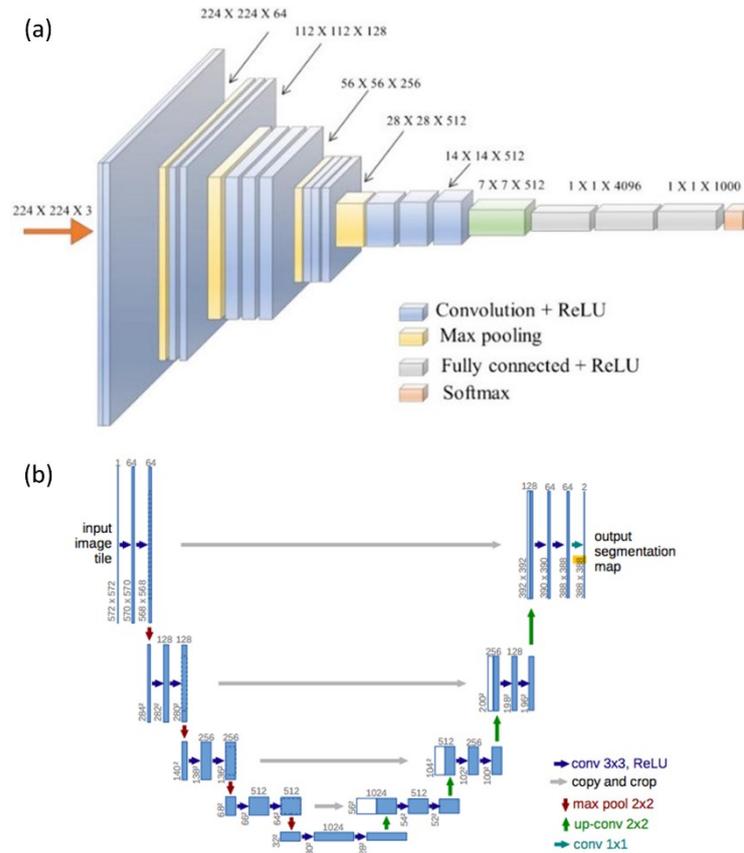


Abbildung 2-17: (a) CNN zur Klassifizierung (VGG16), nach [129]. (b) CNN zur Segmentierung (U-Net), nach [130].

Die Architekturen eines CNN zur semantischen Segmentierung unterscheiden sich von denen zur Klassifizierung, da der Output keine einzelne Klasse, sondern eine Segmentierungskarte in derselben Auflösung des Ausgangsbilds sein muss. Sie bestehen aus einem Encoder und einem Decoder [99], Abbildung 2-17b. Der Encoder wird verwendet, um den Input in eine Darstellung zu kodieren, die effizient durch das Netzwerk verarbeitet werden kann. Dabei wird die räumliche Information reduziert, während die Informationen über Merkmale erhöht werden. Dafür kommen üblicherweise CNN-Architekturen wie bei einer Klassifizierung zum Einsatz. Im Decoder werden Raum- und Merkmalsinformationen über sog. „deconvolutional“ oder „transposed neural networks“ wieder kombiniert und eine Segmentierungskarte erstellt [99]. Eine populäre Architektur ist das U-Net [99].

Da CNN große Datenmengen benötigen, wird oft Data Augmentation angewandt. Dabei wird die Trainingsmenge künstlich vergrößert, indem aus dem Originalbild durch Transformationen wie Rotation, Translation, Spiegeln, Anpassen von Helligkeit und Kontrast o.ä. möglichst realistische neue Trainingsbilder erzeugt werden. Durch Data Augmentation kann die Gefahr einer Überanpassung reduziert und die Generalisierung des CNN verbessert werden [107,126].

Um ein CNN von Grund auf zu trainieren, werden große Datenmengen benötigt, die bei vielen Anwendungsfällen auch mit Data Augmentation nicht ausreichend vorhanden sind. In diesem Fall kann die Technik des Transfer Learning zum Einsatz kommen. Dabei wird versucht, das Wissen aus früheren Aufgaben, also einer Quell-Domäne, auf eine neue Zielaufgabe zu übertragen, für die nur wenig gelabelte Daten existieren [128]. Als Quell-Domänen sind generische Datenquellen, die für ein breites Spektrum von Bildern repräsentativ sind, geeignet [126]. Größtenteils kommt die ImageNet Datenquelle, die über 14 Mio. Bilder aus mehr als 1000 Kategorien des alltäglichen Lebens enthält, zum Einsatz [131]. Wurde ein Modell auf solch einem riesigen Datensatz trainiert, hat es eine gute Darstellung von low-level features wie Ecken, Kanten, Beleuchtung oder Formen gelernt, und diese Merkmale können gemeinsam genutzt werden, um den Wissenstransfer von Quell- zu Zieldomäne zu ermöglichen und dort als Merkmalsextraktor für die Klassifizierung neuer Bilder zu dienen [128].

Stehen gelabelte Trainingsdaten der neuen Aufgabe zur Verfügung, kann ein fine-tuning des CNN stattfinden. Zunächst werden für alle Schichten des CNN die Gewichte des Vortrainierens auf ImageNet übernommen. Anschließend werden die Gewichte der tieferen Schichten und des fully-connector layer als Klassifikator mit den Trainingsdaten der neuen Aufgabe neu trainiert. Die tiefen Schichten erfassen i.d.R. Datensatz-spezifische Merkmale, während die ersten Schichten gut generalisierbare low-level features erlernen und deshalb während des fine-tunings nicht neu trainiert werden [126].

Darüber hinaus ist es möglich, ein auf ImageNet vortrainiertes CNN auch ohne fine-tuning als reinen Merkmalsextraktor zu verwenden. Als Output des CNN wird dann nicht das Klassifizierungsergebnis, sondern der Merkmalsvektor verwendet, der anschließend mit konventionellen ML-Algorithmen weiterverarbeitet werden kann [132].

Eine pauschale Empfehlung für DL oder konventionelles ML kann i.d.R. nicht gegeben werden. DL wird vor allem dann attraktiver, wenn große Mengen an Daten und ausreichend Rechenleistung zur Verfügung stehen [126]. Das Optimieren der Hyperparameter ist beim DL allerdings komplexer, da deutlich mehr Parameter zur Verfügung stehen. Eine Übersicht und kurze Erklärung der Hyperparameter finden sich im Anhang (10.2).

Bei realen Klassifikationsproblemen ist eine reine, strikte Klasseneinteilung nicht immer ausreichend. Stattdessen kann eine probabilistische Klassifizierung sinnvoller sein, d.h. es wird nicht nur die Vorhersage betrachtet, sondern auch die Wahrscheinlichkeit der Vorhersage. Bei künstlichen neuronalen Netzen enthält der finale Softmax Layer einzelne Klassenwahrscheinlichkeiten [126]. Eine SVM ist von sich aus zwar kein probabilistischer Klassifikator, kann durch das Fitten einer geeigneten „score-to-posterior-probability“

Transformation allerdings probabilistisch interpretiert werden [133]. Die Wahrscheinlichkeit einer Vorhersage kann als Vertrauensmetrik zur Beurteilung der Klassifizierung angesehen werden.

2.3.2 Unüberwachtes maschinelles Lernen

Im Gegensatz zum überwachten ML stehen beim unüberwachten ML keine gelabelten Trainingsdaten zur Verfügung. Ziel ist es, Muster in den vorliegenden Daten zu erkennen, und darüber Gemeinsamkeiten und Unterschiede aufzudecken und nützliche Schlüsse daraus zu ziehen [106]. Synonym wird dieser Prozess oft als Clustering bezeichnet [106]. Beim Clustering werden Daten in Teilmengen aufgeteilt. Eine Teilmenge wird als Cluster bezeichnet. Die Datenpunkte in einem Cluster sind sich ähnlich, aber unterscheiden sich von denen in anderen Clustern. Typische Anwendungsfelder sind das Partitionieren von Daten, das Aufstellen neuer Hypothesen und das Prüfen bestehender Hypothesen sowie Vorhersagen basierend auf gefundenen Clustern [134].

Ein Clustering besteht aus (1) der Auswahl geeigneter Merkmale, (2) dem Anwenden eines Clustering Algorithmus, (3) der Validierung des Clusterings, (4) der Interpretation durch einen Domänenexperten [134]. Clustering Algorithmen stützen sich generell auf ein Kriterium zur Bewertung der Qualität einer bestimmten Partitionierung. Basierend auf bestimmten Input-Parametern (z.B. Anzahl der Cluster) versucht der Clustering Algorithmus, die beste Partitionierung der Daten für die gegebenen Input-Parameter zu definieren. Clustering Methoden können grundlegend in partitionierende, hierarchische, Dichte-basierte und Grid-basierte Ansätze unterteilt werden [108]. Da es für jede Methode auch noch verschiedene Typen und Algorithmen gibt, steht eine Vielzahl an Clustering Ansätzen zur Verfügung. Die korrekte Methode hängt ab von Fragestellung und betrachteten Daten, bspw. hinsichtlich Datenformat (numerisch oder kategorisch), der Form der Cluster oder dem Umgang mit Rauschen und Ausreißern [106].

Die Validierung eines Clusterings gestaltet sich schwierig, da i.d.R. kein a-priori Wissen über die Struktur der Daten vorliegt. Dennoch stehen einige mathematische Ansätze zur Evaluierung, u.a. zur Bestimmung der optimalen Anzahl an Clustern, zur Verfügung [106,108]. Insgesamt handelt es sich um ein herausforderndes Feld, einerseits durch die Anforderungen, die die Daten durch hohe Dimensionalitäten, Rauschen, beliebig geformte Cluster oder bestimmte Randbedingungen mit sich bringen [108], andererseits durch die Vielzahl zur Verfügung stehender Algorithmen und die schwierige Validierung. Zusätzlich kann der Einfluss des gewählten Merkmalraums sehr groß sein, was allerdings oft nicht ausreichend diskutiert wird [135,136]. Nichtsdestotrotz kann das unüberwachte ML in Form explorativer Datenanalysen große Mehrwerte darstellen, insbesondere

da eine potenzielle Voreingenommenheit, wie sie beim überwachten ML bei der Zuordnung der Grundwahrheit entstehen kann, weitestgehend ausgeschlossen werden kann.

2.4 Künstliche Intelligenz in der Gefügeanalyse

Während in Disziplinen wie dem autonomen Fahren oder der Biomedizin ML schnell Anwendung fand und konventionelle Ansätze übertraf [99–101], hat sich die Materialwissenschaft zunächst eher langsam auf diese Fortschritte eingelassen. Inzwischen haben KI und ML allerdings in immer mehr Bereichen Einzug gehalten, sind allgegenwärtig und werden immer populärer. So gibt es aktuell bereits separate Konferenz-Sessions oder gar ganze Konferenzen zum Thema ML in der Materialwissenschaft¹. Agrawal et al. [137] identifizieren die „datengetriebene Wissenschaft“, zu der auch ML gehört, gar als das vierte Paradigma der Materialforschung.

Analog zu den generellen Einsatzgebieten von KI und ML (2.3), sind allgemeine Anwendungsbereiche in der Materialwissenschaft das Auswerten großer Mengen hochdimensionaler Daten, das Ersetzen von mühsamen, zeitaufwändigen Arbeiten, die Modellierung analytisch nicht mehr zugänglicher Fragestellungen, sowie alle Aspekte der Bildverarbeitung.

Die amerikanische „The Minerals, Metals & Materials Society“ führte mit angesehenen Experten, die sowohl über die materialwissenschaftliche Expertise als auch das notwendige Knowhow in KI verfügen, eine Studie zur Identifikation von Anwendungsbereichen künstlicher Intelligenz in der Materialwissenschaft und zugehörigen Produktions- und Verfahrenstechniken durch (The Minerals, Metals & Materials Society, TMS, Employing Artificial Intelligence to Accelerate Development and Implementation of Materials and Manufacturing Innovations, [138]). Für die aussichtsreichsten Anwendungsbereiche werden konkrete Empfehlungen zu wichtigen Meilensteinen und Implementierungen ausgesprochen. Diese Studie kann als die erste umfassende, repräsentative Studie zu diesem Themenkomplex angesehen werden. Folgende Anwendungsbereiche werden definiert: (1) das Entdecken und Designen von Werkstoffen, (2) die vorausschauende Wartung und Zustandsüberwachung von Bauteilen, (3) das Erkennen von Anomalien in Fertigungsprozessen, (4) die Werkstoffcharakterisierung in Bezug auf Qualitätskontrollen und Bildverarbeitung. Weitere Bereiche sind die additive Fertigung, autonomes Experimentieren sowie das Auswerten großer Datenmengen wie sie bei Synchrotron Beamlines anfallen. Folgende Mehrwerte werden durch den Einsatz von KI und ML angestrebt: (1) Optimierung von Ressourcen und Automatisierung, (2) Mustererkennung und Vorhersagen,

¹ Z.B. DGM „AI in Material Science and Engineering“, DGM „Materials Week“, TMS “Artificial Intelligence in Materials & Manufacturing“, ASM “International Materials, Applications & Technologies”.

darunter die Identifizierung von Datentrends und Chemie/Prozess-Gefüge-Eigenschaftskorrelationen, (3) verbesserte Zugänglichkeit der Forschung.

Aktuell liegt ein großer Fokus auf dem Entdecken und Designen neuer Materialien. Ein prominentes Beispiel ist die sog. Werkstoff-Genom Initiative (engl. materials genome initiative) zur Entdeckung, Herstellung und zum Einsatz moderner Materialien, die schneller und günstiger entwickelt werden sollen als mit herkömmlichen Methoden [139]. Dabei spielen Ansätze des maschinellen Lernens bereits eine entscheidende Rolle [140–144]. Basierend auf abgeleiteten Korrelationen zwischen Prozess, Gefüge und Eigenschaften können einerseits sog. „forward models“ zur Vorhersage von Eigenschaften gebildet werden. Z.B. sagen Jung et al. [145] aus den Phasenanteilen eines Stahlgefüges mit einem künstlichen neuronalen Netz Streckgrenze und Zugfestigkeit voraus. Herriot et al. [146] bestimmen aus dreidimensionalen repräsentativen Volumenelementen synthetischer Gefüge, die die Strukturen additiv gefertigter Stahllegierungen darstellen, mittels DL ebenfalls die mechanischen Eigenschaften. Shen et al. [147] stellen die Eigenschaftsvorhersage mittels ML und konventioneller metallurgischer Modellierung gegenüber. Dabei kann das ML-Modell die Härte martensitischer ausscheidungshärtender Stähle genauer vorhersagen.

Andererseits können darüber auch sog. inverse Modelle (engl. inverse model) erzeugt werden, die die Entdeckung neuer Materialien, bzw. das Ableiten geeigneter Gefüge- oder Prozessparameter für gewünschte Eigenschaften, ermöglichen sollen. So bestimmten Dong et al. [148] mit Hilfe eines inversen Modells die für bestimmte optische Eigenschaften benötigten Elementanteile in Metalloxid-Verbindungen. Generelles Ziel ist ein „high-throughput screening“ auf Element-Verbindungen mit neuen Eigenschaftskombinationen, das oft rein datengetrieben, i.d.R. basierend auf Simulationsdaten erfolgt. Solche Modelle können in der Folge die Richtung weisen für tatsächliche Experimente oder Simulationen.

Allerdings muss auch ein neues Material nach seiner Entdeckung hinsichtlich seines Gefüges optimiert werden. Dazu, und auch zur Weiterentwicklung bestehender Werkstoffe sind solche Ansätze allerdings nicht zielführend, stattdessen werden gezieltere Methoden benötigt. Hier kommt die Gefügeanalyse und die gefügebasierte Werkstoffentwicklung, basierend auf Prozess-Gefüge-Eigenschaftskorrelationen, ins Spiel. Praktisch alle Fragestellungen in Qualitätskontrolle oder Forschung & Entwicklung erfordern eine (quantitative) Gefügeanalyse. Für diese wird wiederum eine Segmentierung und/oder Klassifizierung der mikroskopischen Gefügaufnahme benötigt. Da dies der Fokus der vorliegenden Arbeit ist, werden Methoden der KI und des ML im weiteren Verlauf nur noch in Bezug auf die Charakterisierung von Stahlgefügen und die dazugehörige Bildverarbeitung betrachtet.

KI und ML können dort ansetzen, wo klassische Herangehensweisen der Gefügeanalyse an ihre Grenzen stoßen. Dies betrifft die immer noch weit verbreiteten einfachen Segmentierungsansätze, wie die Schwellwert-Segmentierung, die bei komplexen Gefügen an ihre Grenzen stoßen, die manuelle Beurteilung und Klassifizierung von Gefügeaufnahmen, bei denen sich Experten uneinig sein können, oder das Bewältigen immer größerer oder höherdimensionaler Datenmengen.

Erfolgreiche Implementierungen von ML zur **Gefüge-Segmentierung** finden sich bereits bei Albuquerque et al. [149,150], die Graphit in Gusseisen sowie Ausscheidungen in Nickelbasislegierungen segmentieren. DeCost et al. [151] verwenden DL zur Segmentierung verschiedener Gefügebestandteile in hoch C-haltigen Stählen. Shen et al. [152] segmentieren Martensit und Restaustenit in Dualphasenstählen sowie Martensit und Restaustenit in Quenching & Partitioning Stählen. Mittels DL detektieren Thomas et al. [153] Oberflächenschädigungen infolge Ermüdungsbelastung in REM-Aufnahmen ferritischer und martensitischer Stähle sowie Kupfer. Populär sind auch sog. trainierbare Segmentierungen [154,155]. Eine Übersicht über Anwendungsmöglichkeiten trainierbarer Segmentierungen am Beispiel niedrig legierter Stähle findet sich in [156]. Gelungene Übersichten über ML-Anwendungen in Segmentierung und Mikroskopie liefern Holm et al. [157] sowie Ge et al. [158].

Einem Großteil der Arbeiten zur **Gefüge-Klassifizierung** lag zunächst ein manuelles Feature Engineering in Kombination mit konventionellem ML zugrunde, mehr und mehr werden nun aber auch DL bzw. Merkmale aus vortrainierten CNN zur Gefügeklassifizierung genutzt. Bereits 2008 nutzte Velichko [159] eine SVM zur Klassifizierung unterschiedlicher Graphitarten im Gusseisen basierend auf deren morphologischen Kenngrößen. Diverse Gusseisenarten werden ebenfalls von Gajalakshmi et al. [160] über Bildtexturparameter (Haralick, LBP) klassifiziert. DeCost et al. [161] verwenden sog. „bags of visual words“² in Kombination mit einer SVM zur Unterscheidung verschiedener Gefügeklassen (unterschiedliche Gusseisenarten, Bronze, übereutektoider Stahl, Nickelbasislegierung, Gefüge mit Zwillingsgrenzen). Dieser Ansatz wird in einer weiteren Arbeit ebenso zur Klassifizierung von metallischen Pulver-Partikeln angewandt [162]. Chowdhury et al. [163] verwenden ML zum Erkennen dendritischer Gefügestrukturen. Dabei stellen sie verschiedene Verfahren der Merkmals-Extraktion und ML-Algorithmen gegenüber. Merkmale aus einem vortrainierten CNN werden in Kombination mit einem RF von Ling et al. zur Klassifizierung von metallischen Pulver-Partikeln genutzt [164]. Auch DeCost et al. [165] nutzen Merkmale aus einem vortrainierten CNN zur Unterscheidung verschiedener Gefügeklassen in hoch C-haltigen Stählen. Weitere Beispiele zum Einsatz von Bildtexturparametern zur

² In der Bildverarbeitung: ein Vektor der Häufigkeit des Auftretens eines Vokabulars von lokalen Bildmerkmalen.

Klassifizierung von Stahlgefügen finden sich in [166,167]. Eine Übersicht von ML-Anwendungen zur Gefügecharakterisierung und -klassifizierung liefern Holm et al. [157]. U.a. werden mittels vortrainiertem CNN verschiedenen nichtmetallische Einschlusstypen im Stahl klassifiziert.

Bezogen auf die in der vorliegenden Arbeit untersuchten **Gefüge von Zweiphasen- und Multiphasenstählen mit dem Fokus auf die verschiedenen Bainit-Unterklassen** finden sich auch ML-Ansätze für eine automatisierte Gefügeklassifizierung. Azimi et al. [168] verwenden DL in Form einer semantischen Segmentierung zum Erkennen von Ferrit, Perlit, Bainit, Martensit und angelassenem Martensit in REM-Aufnahmen von Zweiphasenstählen. Gola et al. führen eine objektweise Klassifizierung der kohlenstoffreichen Zweitphase-Objekte in Zweiphasenstählen durch. Es werden morphologische Parameter und Haralick Texturparameter in Kombination mit einer SVM zur Unterscheidung von Perlit, Bainit und Martensit herangezogen [92,169]. Bainit Unterklassen wurden in diesen Arbeiten jedoch noch nicht berücksichtigt. Tsutsui et al. [94] verwenden Haralick Texturparameter in Kombination mit ML zum Unterscheiden von REM-Aufnahmen mit unterschiedlichen Anteilen an Bainit und Martensit. Dabei werden oberer und unterer Bainit berücksichtigt. Die Arbeiten von Gerdemann [12] sowie Fischer [170] beschäftigen sich intensiv mit bainitischen Stählen und den dabei auftretenden vielfältigen und komplexen Strukturen. Bei der automatisierten Bildanalyse verfolgen sie ähnliche Strategien. Nach einer Segmentierung folgt eine objektweise Klassifizierung, basierend auf Kantenerkennung, Helligkeit und Bildtextur. Letztlich werden bei den bainitischen Gefügen allerdings nur vereinfachte Betrachtungen umgesetzt und letztlich nur bainitischer Ferrit von Karbiden bzw. M/As unterschieden.

Ansonsten sind diverse nicht-ML-basierte Ansätze zu finden. Ackermann et al. [67] setzten eine korrelative Charakterisierung bestehend aus EPMA, EBSD und Nanohärte-Messungen zur Klassifizierung von Nieder-, Mittel- und Hochtemperatur-Bainitmorphologien ein. Bei Miyama et al. [171] werden oberer und unterer Bainit durch Berechnung der morphologischen Parameter der Zementitausscheidungen unterschieden. Banerjee et al. [172] unterscheiden Ferrit, Bainit und Martensit anhand der Intensitätswerte und der Dichte der Substrukturpartikel, während Paul et al. [173] sog. „regionale Konturmuster“ und die lokale Entropie zur Segmentierung von Ferrit, Martensit und Bainit in Zweiphasenstählen verwenden.

Zur Analyse von Multiphasenstahlgefügen finden sich aktuell kaum ML-basierte Auswertungen. Stattdessen ist eine Charakterisierung mittels EBSD und eine konventionelle Auswertung dieser Daten weit verbreitet. In der Arbeit von DeArdo et al. [174] wird eine Multipeakanalyse der IQ-Verteilung zur Unterscheidung von polygonalem, nicht-polygonalem, azikularem und

bainitischem Ferrit sowie kohlenstoffreicher Phasen genutzt. Ferrit und Bainit werden über Missorientierungsparameter wie Kernel Average Misorientation (KAM) oder Grain Average Misorientation (GAM) unterschieden [175,176], teilweise auch unter Berücksichtigung weiterer Parameter wie Korngröße und Aspektverhältnis [177–179]. Radwanski et al. [180] geben Anhaltspunkte für eine qualitative Unterscheidung von polygonalem Ferrit, Bainit und Martensit in Dualphasen- und TRIP-Stählen über IQ, Confidence Index (CI), FIT, KAM und die Missorientierungswinkelverteilung. Li et al. [65] setzen eine korrelative Untersuchung bestehend aus EBSD und EPMA ein. Bainit kann von Martensit anhand der IQ unterschieden werden, und vom Ferrit über GOS und das Aspektverhältnis. Über den KAM Wert wird eine weitere Unterscheidung des Ferrits in schwach und stark missorientiert getroffen. Außerdem wird über den lokalen Kohlenstoffgehalt aus der EPMA-Messung der Bainit weiter unterteilt.

Der Großteil der vorher genannten Beispiele verwendet zur Trennung der Gefügebestandteile lediglich Schwellwerte eines bis maximal vier Parameter. Solch simple Unterscheidungen können unter Umständen zu einer unzureichenden Trennung führen oder nicht sonderlich robust gegenüber der Qualität und Einstellungen der EBSD-Messung sein und bei einer neuen Messung eines ähnlichen Gefüges nicht mehr anwendbar. Oxford Instruments ermöglicht in ihrer EBSD-Auswertesoftware AZtec Crystal daher die Auswertung und Phasentrennung durch die Kombination mehrere Parameter mittels maschinellen Lernens. So werden in einer Anwendungsnotiz [181] KAM, Band Slope und GOS mit ML kombiniert zur Unterscheidung von Ferrit und primärem sowie sekundärem Martensit in einem Quenching & Partitioning Stahl. Zur Unterscheidung unterschiedlicher Bainitarten in diesen Gefügen oder von polygonalem und bainitischem Ferrit in derselben Gefügaufnahme, rein über LM- oder REM-Aufnahmen, werden in der Literatur allerdings kaum Ansätze berichtet. Obwohl trainierbare Segmentierungen, wie die trainierbare WEKA Segmentierung in ImageJ [182], sehr vielversprechend sind und auch komplexe Segmentierungsaufgaben bewerkstelligen können [156], stoßen sie hier an ihre Grenzen.

Generell überwiegen bei der Untersuchung bainitischer Gefüge Arbeiten, die die Gefüge lediglich qualitativ beschreiben oder die Gefüge überwiegend manuell und spezifisch für den jeweils betrachteten Stahl quantifizieren, als Grundlage für eine bestimmte Prozess-Gefüge-Eigenschaftskorrelation. Ansätze für eine automatisierte, allgemein anwendbare Klassifizierung verschiedener Bainit-Unterklassen gibt es dagegen kaum.

Bezogen auf eine Anwendung von ML auf materialwissenschaftliche Fragestellungen sind praktisch alle Aspekte, die ML-Algorithmen oder Datenverarbeitung betreffen, ausreichend erforscht, verstanden und diskutiert. Die Zuordnung der Grundwahrheit als Kernpunkt des

überwachten ML wird allerdings meistens nicht ausführlich behandelt. Dabei ist eine fundierte, objektive und reproduzierbare **Zuordnung der Grundwahrheit** essenzielle Voraussetzung für einen nachhaltig erfolgreichen Einsatz eines ML-basierten Workflows. Durch die sich bietenden Möglichkeiten, einfache Verfügbarkeiten von ML-Code sowie dem regelrechten Hype um ML finden sich jedoch zunehmend Arbeiten, die einen materialwissenschaftlichen Hintergrund nicht nur vermissen lassen, sondern zu fragwürdigem Vorgehen aber auch expliziten Fehlaussagen und -Interpretationen führen [4].

Bei einfachen Fragestellungen, d.h. Gefüge, die für alle Experten eindeutig zu beurteilen sind, stellt auch die Zuordnung der Grundwahrheit kein Problem dar. Je komplexer die Gefüge allerdings werden, also je größer der Interpretationsspielraum bei der Beurteilung und die Uneinigkeit zwischen Experten werden, desto eher kann bei der Zuordnung der Grundwahrheit eine subjektive Komponente entstehen, die sich in der Folge durch den ganzen ML-basierten Workflow ziehen wird. Dies, und die letztlich verwendeten Ansätze zur Zuordnung der Grundwahrheit, werden zu selten ausführlich diskutiert.

Ein einfacher Ansatz bei der Zuordnung der Grundwahrheit ist das Verwenden des Ausschlussprinzips. Dabei werden nicht alle Klassen direkt annotiert, sondern eine Klasse stellt eine Sammelklasse dar, die mittels Ausschlussprinzip zugeordnet wird. Dies ist z.B. bei Gola et al. [92,169] und Azimi et al. [168] der Fall. Dort enthält die Gefügekategorie Bainit alle Aufnahmen, die weder Perlit noch Martensit sind.

Ein gerne verwendeter, weil sehr einfacher Ansatz, ist die Zuordnung der Grundwahrheit basierend auf Unterschieden in Prozessparametern. Teilweise mögen klar zu unterscheidende Herstellungsbedingungen zwar eins zu eins in einer Klassendefinition münden, generell ist dieser Ansatz allerdings mit Vorsicht zu genießen. So definieren Larmuseau et al. [4] für die Klassifizierung von fünf Stahlgüten aufgrund „leichter Unterschiede in Zusammensetzung und Prozessbedingungen“ [4] 60 zu unterscheidende Klassen. Allerdings wird bei diesem Vorgehen das Gefüge missachtet und wieder zurück gegangen zu den früheren empirischen Prozess-Eigenschaftskorrelationen. Darüber hinaus können unterschiedliche Zusammensetzungen und Herstellungsschritte dennoch zu demselben Gefüge führen. Außerdem kann die Definition so vieler Klassen leicht zu einem Overfitting und schlechter Generalisierung des ML-Modells führen. Bulgarevich et al. [183] bspw. unterteilen bei ihrer Klassifizierung die Gefügekategorie Ferrit + Perlit nochmal weiter basierend auf zwei verschiedenen Abkühlraten (0,3 und 1 °C/s), obwohl beide Abkühlraten zu derselben Gefügeausprägung führten. Auch die Grundwahrheit der Klassifizierung von Mulewicz et al. [184] beruht ausschließlich auf Produktionsparametern (Legierung, Abkühlrate). Da darüber hinaus zu keiner der sieben definierten Stahl-Gefügetypen

Gefügeaufnahmen gezeigt werden, ist keinerlei Interpretation der Ergebnisse und Grundwahrheit möglich.

Komenda et al. [155] verwenden eine trainierbare Segmentierung zur Unterscheidung von Ferrit, Perlit, Martensit sowie oberem und unterem Bainit in den LM-Aufnahmen eines gesinterten Stahlgefüges. Da lediglich LM-Aufnahmen gezeigt werden und weder die Zuordnung der Grundwahrheit noch die Segmentierungsergebnisse detailliert diskutiert werden, sind die Ergebnisse allerdings mit Vorsicht zu genießen. Auch Bulgarevich et al. [154] gehen nicht detailliert genug auf ihre Grundwahrheit und Ergebnisse ein. Auch sie verwenden eine trainierbare Segmentierung zur Unterscheidung von Ferrit, Perlit und Bainit in LM-Aufnahmen eines Multiphasen-Stahls. Insbesondere die Segmentierung der ferritischen und bainitischen Bereiche bleibt dadurch für den Leser fragwürdig.

Ein einfaches und effizientes Mittel für eine objektivere Zuordnung der Grundwahrheit sind Ringversuche (engl.: Round Robin Tests), bei denen Gefügeaufnahmen an eine Gruppe von Experten übergeben werden. Jeder Experte beurteilt und klassifiziert die Gefügeaufnahmen. Die finale Klasse wird über einen Mehrheitsentscheid festgelegt, d.h. es wird die Klasse zugeteilt, die von den Experten am häufigsten benannt wurde. Iren et al. [185] generierten einen Datensatz zur Segmentierung von M/As in bainitischen Stählen. Dabei wird ein Objekt nur dann als M/A akzeptiert, wenn es von mindestens zwei der drei Experten annotiert wurde. Zur Klassifizierung der Graphit-Arten in Gusseisen gab es bereits intensive Anstrengungen in Form mehrerer Ringversuchen, um eine objektivere Grundlage der Beurteilung zu schaffen [186]. Dort wurden nicht nur die Einteilungen der Graphit-Art verschiedener Experten verglichen, sondern auch die Einflüsse von Probenpräparation, Bildaufnahme und Segmentierung auf die Einteilung sowie die Bestimmung der sog. Nodularität evaluiert.

Im Arbeitskreis Fraktographie der Deutschen Gesellschaft für Materialkunde (DGM) wurden in einem von Ringversuch Bruchflächen unterschiedlicher Metall-Legierungen von bis zu 40 Experten beurteilt. Deren Ergebnisse wurden zunächst in Form von „Confidence-Karten“ visualisiert. Nachfolgend wurde ein Mehrheitsentscheid durchgeführt, um jeden Pixel in der Bruchflächenaufnahme definitiv einer Klasse zuzuordnen. Dieses Mehrheitsentscheid-Ergebnis dient letztlich als Input für eine ML-Klassifizierung [187].

Für ein besseres Verständnis der Graphit-Morphologien in Gusseisen, und wie sich deren dreidimensionale Struktur in zweidimensionalen Gefügeaufnahmen äußert, erstellten Velichko et al. [188] 3D-Tomographien verschiedener Graphit-Arten. Aus der 3D-Rekonstruktion können beliebige 2D-Schnitte erzeugt werden. Dies ermöglicht die systematische Untersuchung aller

möglichen Erscheinungsformen jeder Klasse sowie der Übergänge zwischen Klassen und der Trennung unterschiedlicher Klassen.

In Bezug auf Datenmengen und Grundwahrheiten spielen auch synthetische Daten eine wichtige Rolle. Der Vorteil synthetischer Daten ist, dass die Grundwahrheit beim Generieren der Daten i.d.R. ebenfalls erzeugt wird. Außerdem können gezielt Daten selten auftretender Klassen bzw. Ereignisse effizient erstellt werden. Es existieren Ansätze aus aktueller Informatik-Forschung, u.a. Konzepte digitaler Wirklichkeiten [189], die Synthese von Bildtexturen über „exemplar-based inpainting“ [190,191], „image quilting“ [192] oder „Markov Random Field“ [193]. Zusätzlich gibt es Texturübertragungsmethoden auf der Grundlage von CNNs [194]. Diese Ansätze wurden bisher jedoch noch nicht, oder nur teilweise, auf materialwissenschaftliche Fragestellungen übertragen. Eine vielversprechende Methode sind auch „Generative Adversarial Networks“ (GAN), die unter anderem dafür bekannt sind, photorealistische Bilder erzeugen zu können [195] und dementsprechend zum Generieren synthetischer Daten genutzt werden können [196]. Ein Beispiel sind erste Versuche zur Generierung synthetischer Gefügeaufnahmen von Gusseisen mit Hilfe von GAN [197]. Ziel ist dort zunächst das Generieren klarer, definierter Graphit-Morphologien für den Einsatz in Normen und Richtreihen. Solche Ansätze ließen sich auch für das Thema Grundwahrheit für ML nutzen. Dahmen et al. [189] stellten einen modellbasierten Ansatz zum überwachten ML aus synthetischen Daten vor. Die Grundidee besteht darin, Messungen auf der Grundlage von Szenen zu simulieren, die durch parametrische Modelle der realen Welt erzeugt wurden. Durch die Untersuchung des Parameterraums, der durch solche Modelle definiert wird, können Trainingsdaten inklusive Grundwahrheit auf kontrollierte Weise erzeugt werden. Ein vorgestellter Anwendungsfall ist das Detektieren von Oberflächenrissen. Der Verwendungszweck synthetischer Daten ist bisher überwiegend die Zeitersparnis durch weniger Experimente und der Input für Modellierungen oder Simulationen [198,199]. Eine generelle Erkenntnis über Anwendungsmöglichkeiten und -grenzen der verschiedenen Methoden in Bezug auf das Generieren von Gefügeaufnahmen fehlt bisher allerdings noch.

Ein vielversprechender Ansatz zur Generierung der Grundwahrheit ist das Verwenden korrelativer Mikroskopie-Ansätze (siehe Kapitel 2.2.2). Die Verwendung korrelativer EBSD-Aufnahmen wurde bereits in eigenen Vorarbeiten [200,201] vorgeschlagen. Auch Shen et al. [152] nutzen korrelative EBSD-Aufnahmen zum Generieren der Annotationen zur Segmentierung von REM-Aufnahmen von Stahlgefügen. Dort werden Martensit und Restaustenit in zweiphasigen Stählen sowie Ferrit, Martensit und Restaustenit in Quenching & Partitioning Stählen segmentiert. Die EBSD-basierten Annotationen erfolgten über die Phase Map bzw. eine Kombination aus Phase Map und Band Slope Map.

Eine Hilfestellung beim Zuordnen der Grundwahrheit kann auch das unüberwachte ML darstellen [200]. In erster Linie kann es der explorativen Datenanalyse dienen, bspw. durch geeignete Visualisierungen, die ein besseres Verständnis der vorliegenden Daten ermöglichen, z.B. hinsichtlich Qualität und Trennbarkeit der Daten. Durch ein Clustering kann außerdem die eigene Klasseneinteilung evaluiert werden. Dabei kann auch untersucht werden, welche Datenpunkte im Zentrum eines Clusters liegen, und welche zwischen zwei Clustern liegen. Darüber können auch Ausreißer detektiert und entfernt werden. Im Idealfall kann das Clustering als “pre-labeling” verwendet werden. Dies würde die Objektivität und die Effizienz der Zuordnung der Grundwahrheit verbessern.

Ein Ansatz zum Clustern von Bilddaten mittels unüberwachtem ML wurde von Kitahara et al. vorgestellt [132]. Mittels vortrainiertem CNN werden aus den Bildern Merkmale extrahiert. Durch Hauptkomponentenanalyse (engl. principal component analysis, PCA) und t-distributed stochastic neighbor embedding (t-sne) werden die Dimensionen auf zwei reduziert. Ausgehend von dieser 2D Darstellung werden mittels k-means Algorithmus Cluster erkannt und visualisiert. Dieser Ablauf wird auf die Klassifizierung von sechs Arten an Oberflächendefekten sowie zwei Arten von REM-Aufnahmen von Bruchflächen angewendet. Analog benutzen auch Tsopanidis et al. [202] einen Ablauf aus vortrainiertem CNN, PCA, t-sne und k-means zur Unterscheidung verschiedener Bruchflächen von Wolfram-Legierungen sowie zur Visualisierung relevanter Merkmale in den Bruchflächen. Kim et al. [203] benutzen unüberwachtes ML zur Segmentierung von Stahlgefügen. Die LM-Aufnahme wird über einen Superpixel-Algorithmus in kleinere Bereiche aufgeteilt. Von jedem Bereich werden über ein vortrainiertes CNN Merkmale extrahiert, die anschließend gruppiert werden, worüber die letztliche Segmentierung erstellt wird. Ein kombinierter Workflow aus Merkmals-Extraktion, Klassendefinition, Klassifizierung und Fehlerevaluierung wird von Kunselmann et al. [204] am Beispiel von synthetischen Gefügeaufnahmen vorgeschlagen.

3 Präzisierte Aufgabenstellung

In der Materialwissenschaft wird ML bisher überwiegend zum Automatisieren von vergleichsweise einfachen Fragestellungen genutzt, bei denen Zeitersparnis, Effizienzsteigerung oder das Entlasten der Experten von mühsamen, wiederkehrenden Aufgaben im Vordergrund steht, demonstriert an maßgeschneiderten Datensätzen. ML ist jedoch auch in der Lage, anspruchsvolle Fragestellungen und Auswertungen komplexer Gefüge überhaupt erst zu ermöglichen. Dabei ist es jedoch nicht mehr ausreichend, lediglich Gefügebildungen oder aus diesen Aufnahmen extrahierte Daten zu betrachten und diese in einen ML-Algorithmus einzuspeisen. Vielmehr ist die ML-basierte Auswertung in einem ganzheitlichen Ansatz zu betrachten, der alle Schritte hin zur Erzeugung einer Gefügebildung und im Hinblick auf das ML speziell die Zuordnung der Grundwahrheit berücksichtigt. Das erste Ziel dieser Arbeit ist demnach die **Definition eines solchen ganzheitlichen Ansatzes** und der darin zu berücksichtigenden Schritte.

Dabei spielt insbesondere die Zuordnung der Grundwahrheit eine entscheidende Rolle für den Erfolg der ML-basierten Auswertung. Je komplexer die Gefüge werden, desto schwieriger wird es, die für das ML benötigte Grundwahrheit objektiv und reproduzierbar zuzuordnen. Dies ist insbesondere dann der Fall, wenn der menschliche Experte gezwungen ist, sich ausschließlich auf das visuelle Erscheinungsbild der Gefüge zu verlassen, welches von verschiedenen Experten in unterschiedlicher Weise wahrgenommen werden kann. Ggfs. sind an dieser Stelle unterstützende Methoden einzusetzen, wobei der korrelativen Mikroskopie große Bedeutung zukommt. EBSD bietet sich als ideale komplementäre Informationsquelle zu Mikroskopaufnahmen an, da es sich um tatsächliche Messdaten handelt, und die Interpretation nicht davon abhängig ist, wie das Gefüge auf das Auge des menschlichen Betrachters wirkt. Folglich besteht das zweite Ziel in der **Entwicklung einer Methodik zur korrelativen Gefüge-Charakterisierung mittels LM, REM und EBSD** im Rahmen des zuvor definierten ganzheitlichen Ansatzes, der die Verknüpfung der EBSD-Messdaten mit den Mikroskopaufnahmen aus LM und REM vorsieht.

Der definierte ganzheitliche Ansatz und die Methodik der korrelativen Mikroskopie sollen allgemein anwendbare Werkzeuge für beliebige Gefüge darstellen. Anhand des definierten Ablaufs und der entwickelten Methodik werden anschließend ML-basierte Workflows zur Segmentierung und Klassifizierung von Gefügen vorgestellt. Als anspruchsvolles Beispiel wurde Stahl mit dem komplexen Gefügebestandteil Bainit ausgewählt.

Eine erste Fallstudie beschäftigt sich mit der **Klassifizierung von Bainit-Unterklassen in Zweiphasenstählen**. Als Ausgangspunkt hierfür dient ein in einem vorherigen

Promotionsverfahren [205] generierter Datensatz sowie die dort etablierte objektweise Klassifizierung der kohlenstoffreichen Zweitphase in die Hauptklassen Perlit, Bainit und Martensit. Die Erweiterung der Klassen um die Bainit-Unterklassen erfordert eine neue Annotation. Diese objektiv und reproduzierbar zu gestalten, stellt die größte Herausforderung dieser Aufgabe dar, da es bei bainitischen Gefügen selbst unter Experten oft Uneinigkeiten gibt. Dies wird zunächst im Rahmen eines Ringversuchs erfasst. Als unterstützende Methoden kommen eine korrelative Charakterisierung mittels EBSD sowie gezielt hergestellte Referenzproben zum Einsatz. Eine zweite Fallstudie beschäftigt sich mit der **Segmentierung und Klassifizierung von Multiphasenstählen**. Zwei Aufgabenstellungen werden behandelt: Zum einen die ML-Segmentierung des lattenförmigen Bainits in LM- und REM-Aufnahmen basierend auf Grundwahrheiten aus korrelativen EBSD-Aufnahmen und zum anderen die robuste EBSD- und ML-basierte Klassifizierung von bainitischem und polygonalem Ferrit.

Große Teile der vorliegenden Arbeit wurden bereits in der Fachliteratur veröffentlicht [200,201,206–208].

4 Probenmaterial

Grundlage für die Bearbeitung der in Kapitel 3 formulierten Aufgabenstellungen sind geeignetes Probenmaterial und eine qualitativ hochwertige Probenpräparation. Das gesamte Probenmaterial wurde aus der Produktion der Aktien-Gesellschaft der Dillinger Hüttenwerke entnommen. Sowohl die chemische Zusammensetzung als auch die Herstellungsschritte spielen für die Bearbeitung der formulierten Aufgabestellungen lediglich eine untergeordnete Rolle. Daher wird das Probenmaterial hier nur in die beiden Hauptgefügetypen Zweiphasenstahl und Multiphasenstahl unterteilt und hinsichtlich der auftretenden Gefüge kurz beschrieben.

4.1 Zweiphasenstähle

Im Gegensatz zur Literatur, in der unter Dual- bzw. Zweiphasenstählen nur ferritisch-martensitische Gefüge verstanden werden, werden in der vorliegenden Arbeit allgemein zweiphasige Stähle aus einer Matrix aus polygonalem Ferrit und einer C-reichen Zweitphase, die in Form von Perlit, unterschiedlichen Bainitarten oder Martensit vorliegen kann, verstanden. Das Probenmaterial des Typs Zweiphasenstahl wurde so ausgewählt, dass eine möglichst große Bandbreite dieser Güten abgedeckt wird. Segmentierungen dieser Gefüge zur Trennung von Matrix und Zweitphase sind bereits etabliert [156,205], typische darauf aufbauende Fragestellungen sind dann die anschließende Klassifizierung der Zweitphase.

Wie in 2.1.1 und 10.1 beschrieben, gibt es eine Vielzahl an Klassifizierungsschemata für Stahlgefüge und Bainit. Das letztlich zu verwendende Schema sollte anwendungsorientiert sein, d.h. es sollte im allgemeinen Sprachgebrauch leicht gebräuchlich und zur Verwendung in Prozess-Gefüge-Eigenschafts-Korrelationen geeignet sein. Aus diesem Grund und da die auftretenden Gefüge damit am besten erfasst werden, fällt die Wahl auf das Schema von Zajac et al. [10] (siehe 2.1.1). Andere Schemata wie das von Gerdemann und Song (siehe 10.1) mögen zwar eine ausführliche Beschreibung der vorliegenden Phasen liefern, letztlich ist der dafür generierte Buchstabencode im allgemeinen Sprachgebrauch und für Korrelationen nicht praktikabel. Letztlich werden sieben Klassen für die Klassifizierung berücksichtigt: Perlit, degenerierter Perlit, Zementit-Bruchstücke, Produkte unvollständiger Umwandlung, oberer Bainit, unterer Bainit und Martensit (Abbildung 4-1).

Perlit (P) weist ausgeprägte, regelmäßige und meist durchgängige Lamellenstrukturen auf. Im Vergleich zu Perlit weist degenerierter Perlit (DP) unvollständige oder nicht sehr ausgeprägte, nicht kontinuierliche Lamellenstrukturen auf. Zementit-Bruchstücke (debris of cementite, DC)

bestehen aus Zementitpartikeln an Objektgrenzen oder im Inneren der Objekte und zeigen keine lamellaren oder lattenartigen Strukturen.

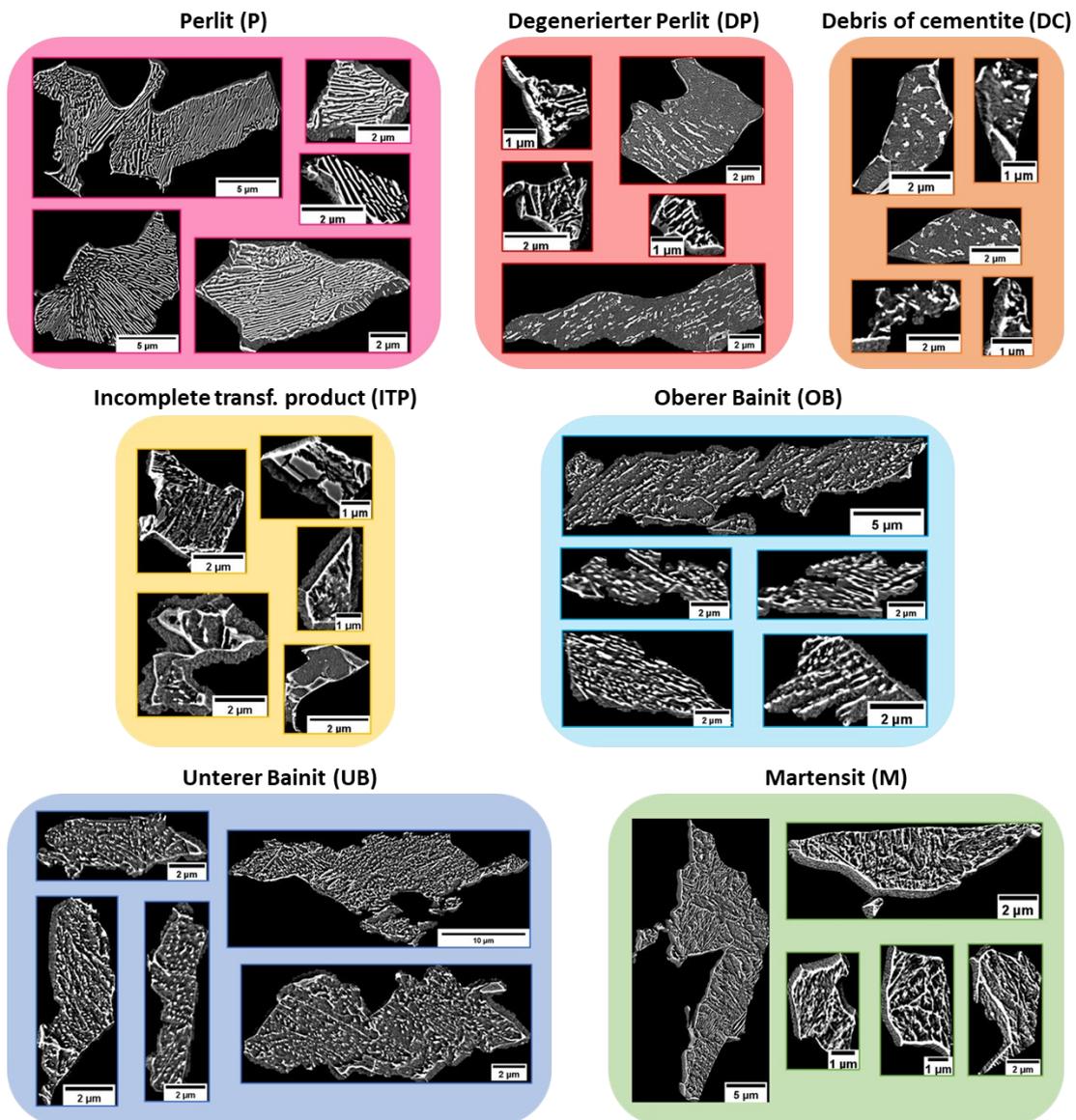


Abbildung 4-1: Zur Klassifizierung der Zweiphasenstähle berücksichtigte Gefügeklassen.

Produkte unvollständiger Umwandlung (incomplete transformation products, ITP) bestehen aus fragmentierten Ferrit-, Zementit- und M/A-Bruchstücken, die sich bilden, wenn der Austenitzerfall aufgrund von Legierungselementen, die die Ferritwachstumsraten verringern, stoppt, sodass sich der Restaustenit in ein „ungewöhnliches Gefüge“ umwandelt [10]. Ausschlaggebend für die Zuordnung zu dieser Klasse ist das Vorhandensein von nicht vollständig umgewandelten Austenit oder M/As. Oberer Bainit (OB) besteht aus lattenförmigem Ferrit mit Zementit an den Ferritlatten, während unterer Bainit (UB) aus lattenförmigem Ferrit mit Zementitausscheidungen innerhalb der Ferritlatten besteht. Weitere bainitische Gefügestrukturen,

wie degenerierter oberer Bainit oder separate M/A Partikel, die nicht Teil eines ITP-Objektes sind, traten in den betrachteten Proben nicht auf. Eine Unterscheidung zwischen Martensit und selbst-angelassem Martensit wurde nicht getroffen.

Stellvertretende Gefügaufnahmen für die Zweiphasenstähle mit überwiegend perlitischer, bainitischer und martensitischer Zweitphase finden sich im Anhang (10.3). Aufgrund der Feinheit der Strukturen kann der bainitische Ferrit im LM oder im REM bei geringer Vergrößerung größtenteils nicht als separater Gefügebestandteil erkannt werden.

4.2 Multiphasenstähle

Im Kontext der vorliegenden Arbeit sind mit Multiphasenstählen Gefüge mit mehr als zwei dominanten Gefügebestandteilen gemeint. Typischerweise bestehen sie aus bainitischem Ferrit, polygonalem Ferrit und fein verteilten C-reichen Zweitphasen wie Zementit, Martensit oder Restaustenit [7,209]. Dies trifft auch auf die in der vorliegenden Arbeit betrachteten Gefüge zu. Die C-reiche Zweitphase tritt dort jedoch in einer größeren Vielfalt auf, z.B. als Zementit, Zementit-Aggregate, Martensit, M/A oder Restaustenit. C-reiche Zweitphasen treten sowohl innerhalb der bainitischen Bestandteile als auch zwischen polygonalen Ferritkörnern auf. Der bainitische Ferrit kann sowohl lattenförmig als auch in irregulärer Form vorliegen (siehe 2.1.1). Das Probenmaterial des Typs Multiphasen-Stahl wurde so ausgewählt, dass eine möglichst große Bandbreite dieses Typs abgedeckt wird. Dies betrifft unterschiedlich hohe Anteile ferritischer und bainitischer Bestandteile, das Vorhandensein von sowohl granularem als auch lattenförmigem Bainit sowie verschiedene Ausprägungen C-reicher Zweitphasen. Zusätzlich wurden für die Unterscheidung von bainitischem und polygonalem Ferrit voll-ferritische und voll-bainitische Proben bzw. Probenbereiche ausgewählt.

Typische Fragestellungen der Segmentierung und Klassifizierung sind die Bestimmung der C-reichen Zweitphase, die Unterscheidung von bainitischem und polygonalem Ferrit sowie die Segmentierung des lattenförmigen Bainits. Unter dem Begriff lattenförmiger Bainit werden hier oberer und degenerierter oberer Bainit (siehe 2.1.1) zusammengefasst. Unterer Bainit tritt in diesen Stählen aufgrund des geringen C-Gehalts i.d.R. nicht auf (siehe 2.1.1). Abbildung 4-2 zeigt die LM-Aufnahme eines Multiphasen-Stahls inklusive einer Visualisierung dieser Fragestellungen.

Im Gegensatz zu den Zweiphasenstahlgefügen liegt der Bainit in diesem Fall mit größeren und bereits im LM erkennbaren Anteilen an bainitischem Ferrit und allgemein in größeren Strukturen vor.

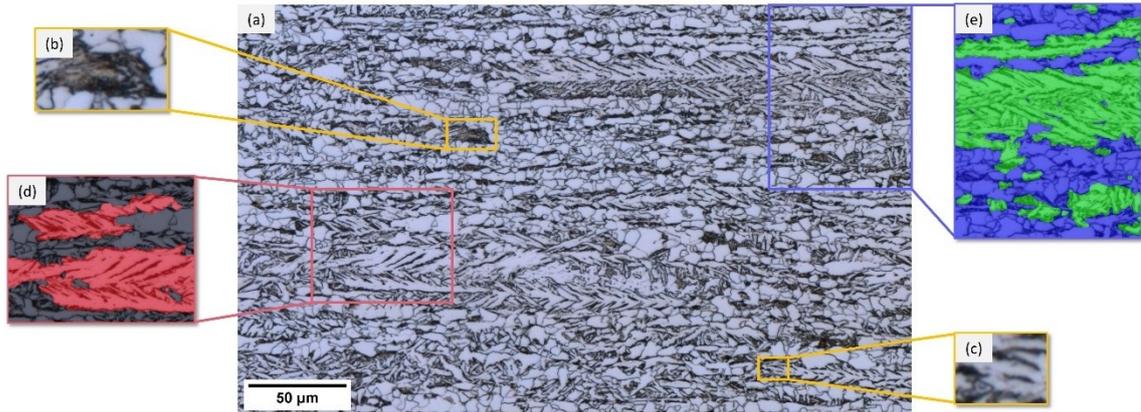


Abbildung 4-2: Aufgabestellungen der Segmentierung und Quantifizierung von Multiphasen-Stahlgefügen. (a) LM-Aufnahme. (b), (c) Unterschiedliche C-reiche Zweitphasen. (d) Segmentierung des lattenförmigen Bainits. (e) Unterscheidung von bainitischem und polygonalem Ferrit.

4.3 Probenauswahl und Herstellung von Referenzproben

In der Theorie weisen die Klassen oberer und unterer Bainit durchaus prägnante Unterschiede in der Anordnung der Karbidausscheidungen auf und sollten daher mit entsprechender Auflösung einfach zu unterscheiden sein. In der industriellen Praxis und kommerziellen Stahlgüten sind die beschriebenen Abgrenzungen und „Lehrbuch-Strukturen“ mutmaßlich durch komplexe Legierungsdesigns und thermomechanische Prozesse sowie generell mehr Freiheitsgraden in der industriellen Produktion nur selten erkennbar, so auch beim in dieser Arbeit verwendeten Probenmaterial. Zum Erhalt klar definierter bainitischer Gefüge, insbesondere von oberem und unterem Bainit, wurden aus diesem Grund mittels Abschreckdilatometer gezielt Proben hergestellt. Basierend auf Literaturrecherchen wurde für das Probenmaterial eine Zusammensetzung ähnlich zur „steel group II“ aus Zajac et al. [23] ausgewählt, bei der überwiegend bis vollständig bainitische Gefüge zu erwarten sind (Tabelle 4-1).

Tabelle 4-1: Chemische Zusammensetzung in Gew.-% des zur Herstellung der Referenzproben verwendeten Stahls. Aufgrund von Geheimhaltungsvereinbarungen können die exakten Gehalte der Mikrolegierungselemente nicht angegeben werden.

C	Mn	Si	Cr	Ni	Nb	Ti	B
0.22	0.90	0.40	0.20	0.20	Mikrolegierungselemente		

Das Probenmaterial wurde aus einem Blech aus industrieller Produktion nach dem thermomechanischen Walzprozess und nachfolgender kontrollierter Abkühlung entnommen. Daraus wurden Proben von 4 mm Durchmesser mit einer Länge von 10 mm für ein TA Instruments 805 A/D Abschreckdilatometer hergestellt. Proben wurden sowohl mit kontinuierlicher Abkühlung als auch durch isotherme Umwandlung hergestellt. Für beide

Varianten wurden die Proben für 10 min bei 1000 °C austenitisiert. Die kontinuierliche Abkühlung erfolgte mit Abkühlraten zwischen 2 °C/s und der maximal möglichen Abkühlrate von 278 °C/s, um ein breites Spektrum verschiedener Gefüge zu erhalten. Zur Festlegung der isothermen Umwandlungstemperaturen wurde sich ebenfalls an Literaturwerten sowie der mittels der Simulationssoftware JMatPro berechneten Martensitstarttemperatur von 395 °C orientiert. Letztlich wurden die drei Umwandlungstemperaturen 425, 475 und 525 °C gewählt.

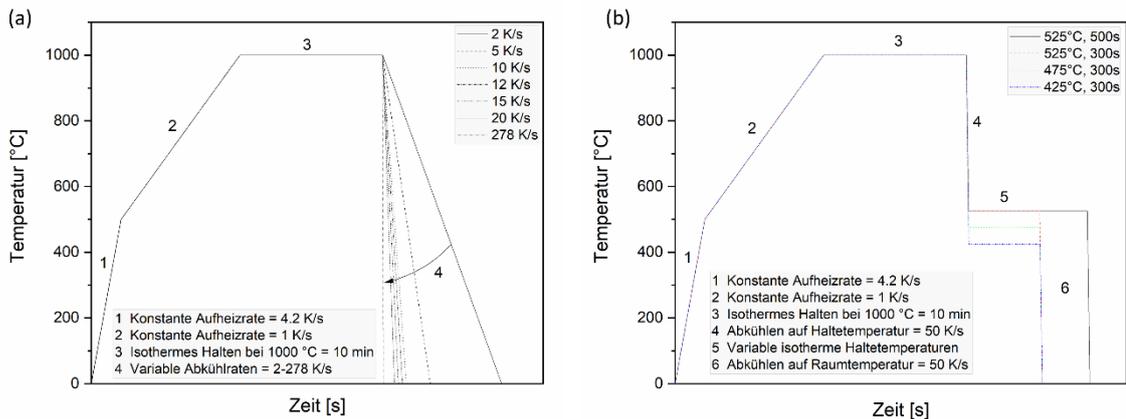


Abbildung 4-3: Temperatur-Zeit-Profile der Probenherstellung im Abschreckdilatometer. (a) kontinuierliche Abkühlung, (b) isotherme Umwandlung.

Ein wesentlicher Mehrwert der Probenherstellung im Abschreckdilatometer ist die parallele Aufnahme der Dilatometerkurven, die zusätzlich Informationen über Phasenumwandlungen und Phasenanteile der Proben liefern. Tabelle 4-2 und Tabelle 4-3 fassen die dominierenden Gefügebestandteile in den hergestellten Proben zusammen. Für die weitere Auswertung und die Zuordnung der Grundwahrheit (Kapitel 7.2.2.1) wurde sich auf die Proben der isothermen Umwandlung fokussiert. Abbildung 4-4 zeigt Referenz-Gefügeaufnahmen von oberem und unterem Bainit.

Tabelle 4-2: Vorliegende Gefügebestandteile in den Referenzproben nach kontinuierlicher Abkühlung.

Abkühlrate [°C/s]	Dominierender Gefügebestandteil	Weitere Gefügebestandteile
2	Perlit	Ferrit (polygonal, irregulär)
5	Granularer Bainit	Reste von Perlit, Beginn von degeneriertem oberem Bainit
8	Degenerierter oberer Bainit	Oberer Bainit, Reste von Perlit
10	Lattenförmiger Bainit: degenerierter oberer, oberer und unterer Bainit	Erste Martensit-Bestandteile

Fortsetzung von Tabelle 4-2

12	Lattenförmiger Bainit: degenerierter oberer, oberer und unterer Bainit	Martensit
15	Lattenförmiger Bainit: degenerierter oberer, oberer und unterer Bainit	Martensit
20	Martensit	Lattenförmiger Bainit: oberer und unterer Bainit
278	Martensit	-

Tabelle 4-3: Vorliegende Gefügebestandteile in den Referenzproben nach isothermer Umwandlung.

Umwandlungs-temperatur [°C]	Haltezeit [s]	Dominierender Gefügebestandteil	Weitere Gefügebestandteile
525	500	Oberer Bainit	Unterer Bainit + Martensit und Perlit als Produkte der Abschreckung des nicht vollumgewandelten Austenits
525	300	Oberer Bainit	Unterer Bainit + Martensit und Perlit als Produkte der Abschreckung des nicht vollumgewandelten Austenits
475	300	Unterer Bainit	Martensit, degenerierter oberer Bainit und Perlit als Produkte der Abschreckung des nicht vollumgewandelten Austenits
425	300	Unterer Bainit	-

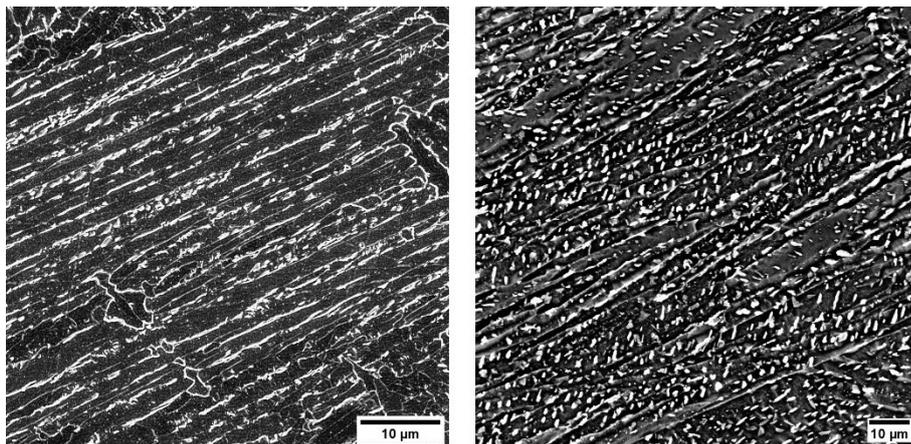


Abbildung 4-4: REM-Aufnahmen der isotherm umgewandelten Referenzproben. (a) vollständig oberer Bainit. (b) vollständig unterer Bainit.

4.4 Probenpräparation

Das Material für die Schliffproben wurde aus Blechen der industriellen Produktion der Aktiengesellschaft der Dillinger Hüttenwerke entnommen. Die Schliffproben haben ungefähre Maße von 30 x 15 x 15 mm (Länge x Breite x Höhe). Zum Erzielen reproduzierbarer Ergebnisse muss eine ausgezeichnete Oberflächenqualität gewährleistet werden. Sofern nicht explizit anders erwähnt, wurden alle Proben gemäß der in Tabelle 4-4 aufgeführten Schleif- und Polierschritte präpariert. Ein Einbetten der Schliffproben war nicht nötig. Die Dilatometerproben wurden aufgrund ihrer kleinen Dimensionen dagegen eingebettet.

Tabelle 4-4: Schritte der Probenpräparation.

Prozess	Schleifscheibe/ Poliertuch	Suspension	Zeit
Schleifen	Struers MD-Piano 80	-	Bis plan
Schleifen	Struers MD-Piano 180	-	Bis keine Schleifriefen des vorherigen Schritts mehr erkennbar sind
Schleifen	Struers MD-Piano 320	-	
Schleifen	Struers MD-Piano 500	-	
Schleifen	Struers MD-Piano 1200	-	
Polieren	Struers MD-Dac	Struers DiaDuo-2, 6 μm	5 min
Polieren	Struers MD-Mol	Struers DiaDuo-2, 3 μm	5 min
Polieren	Struers MD-Nap	Struers DiaDuo-2, 1 μm	5 min

Eine hochwertige Probenpräparation ist insbesondere für EBSD essenziell, damit keine Verformungsschichten oder Artefakte abgebildet werden [210]. Daher wurde vor EBSD-Messungen zusätzlich ein finaler Politurschritt mit einer kolloidalen SiO_2 -Suspension von 0,04 μm (OP-S, Firma Struers) durchgeführt.

4.5 Probenkontrastierung

Zur Kontrastierung der Gefüge kamen verschiedene Ätzmittel zum Einsatz. Einerseits wurde eine 2 %ige Nital Ätzung (2 ml 65 %ige Salpetersäure, 98 ml Ethanol) mit Ätzzeiten zwischen 15-25 s angewandt. Der Ätzvorgang wurde gestoppt, indem die Probe kurz mit Wasser abgespült und schließlich mit Ethanol gereinigt und mit Druckluft getrocknet wurde. Nital ist eine in der Stahlcharakterisierung weit verbreitete Strukturätzung, die sowohl Ferritkorngrenzen als auch kohlenstoffreiche Phasen kontrastiert.

Andererseits wurde die modifizierte Beraha Ätzung nach [34] angewandt. Die Ätzlösung besteht aus 3 g Kaliummetabisulfit in 100 ml destilliertem Wasser. Prinzipiell handelt es sich bei diesem Ätzmittel um eine Farbätzung, wobei der Farbeffekt erst bei langen Ätzzeiten auftritt. Bei den

angewandten kurzen Ätzzeiten zwischen 20-40 s wirkt die modifizierte Beraha als Strukturätzung. Der Ätzvorgang wurde durch Abspülen mit Ethanol gestoppt und die Probe mit Druckluft getrocknet. Kohlenstoffreiche Phasen werden kontrastiert, im Gegensatz zur Nital Ätzung werden Ferritkorngrenzen jedoch kaum kontrastiert [45]. Beide Ätzungen eignen sich zur Untersuchung in LM und REM. Es handelt sich bei beiden um Tauchätzungen. Die Probe wurde während des Ätzvorgangs durchgehend leicht bewegt. Das Ätzen erfolgte auf Sicht und basierend auf Erfahrungswerten.

Zur reinen REM-Untersuchung kam ebenfalls eine elektrolytische Ätzung mit Struers Elektrolyt A2 zum Einsatz. Die Probe wird mit der Schliifffläche nach unten in einer Struers Lectropol platziert. Dort wird sie von einem Elektrolyten umspült und gleichzeitig mit einer Stromquelle verbunden, um den Ätzangriff zu starten. Der gesamte Vorgang findet automatisiert in einer geschlossenen Kammer statt. Folgende Einstellungen wurden verwendet: 1 V Ätzspannung, Flussrate 17, Ätzzeit 4 s. Die Kontrastierung ist vergleichbar zu der nach Nital, allerdings ist der Topografie-Kontrast im REM geringer.

4.6 Gefügecharakterisierung

Die den Kapiteln 6, 7 und 8 zugrunde liegende Gefügecharakterisierung erfolgte mittels LM, REM und EBSD. Für die Lichtmikroskopie kam das LM in einem Olympus LEXT OLS 4100 Laser-Scanning-Mikroskop zum Einsatz. Die Bilder wurden bei 1000-facher Vergrößerung mit einer Bildgröße von 1024×1024 px aufgenommen, was einer Fläche von $129,6 \times 129,6$ μm entspricht (Pixelgröße = 126,6 nm). Es wurde darauf geachtet, dass alle Bilder mit den möglichst gleichen Kontrast- und Helligkeitseinstellungen aufgenommen wurden.

Zwei verschiedene REM wurden verwendet: ein Zeiss Merlin FEG-REM sowie ein Zeiss Supra FEG-REM. Die Gefügaufnahmen erfolgten bei einer Beschleunigungsspannung von 5 kV, 5 mm Arbeitsabstand und einem Strahlstrom von 300 oder 10000 pA (Zeiss Merlin) bzw. einer Blendengröße von 30 μm zum Einstellen des Strahlstroms (Zeiss Supra). Es wurden sowohl ein Everhart-Thornley-Kammerdetektor (EDT, „SE2“ in Zeiss Terminologie) als auch ein Inlens-Sekundärelektronendetektor verwendet. Vergrößerungen und Auflösungen sind abhängig von der untersuchten „region of interest“ (ROI) und dem Untersuchungsziel. Bilder wurden entweder bei 1000-facher Vergrößerung mit einer Bildgröße von 4096×3072 px im Zeiss Merlin (entspricht einer Fläche von $113,8 \times 85,3$ μm , Pixelgröße = 27,8 nm) aufgenommen oder bei 2000-facher Vergrößerung mit einer Bildgröße von 2048×1536 px im Zeiss Supra (entspricht einer Fläche von $56,7 \times 42,5$ μm , Pixelgröße = 27,8 nm). Es wurde darauf geachtet, dass alle Bilder mit den möglichst gleichen Kontrast- und Helligkeitseinstellungen aufgenommen wurden.

Die EBSD-Messungen erfolgten in einem Zeiss Merlin FEG-REM, ausgestattet mit einer EDAX Hikari Kamera, mit einer Beschleunigungsspannung von 25 kV, einem Strahlstrom von 10 nA bei einem Arbeitsabstand von 15 mm und einem Sample-Tilt von 70 °. Diese Messeinstellungen haben sich für die betrachteten Gefüge in bisherigen Arbeiten in der Dillinger Grobblechforschung bewährt. Die Beugungsmuster wurden mit einer Bildauflösung von 160 x 120 px aufgenommen (4x4 Binning). Vergrößerungen und Schrittweiten sind generell abhängig von der ROI und dem Untersuchungsziel. Bei den zur Methodikentwicklung untersuchten Proben wurde eine 200-fache Vergrößerung und eine Schrittweite von 0,35 µm verwendet. Messungen wurden sowohl mit einem hexagonalen als auch einem regulären Grid aufgenommen. Die Messgeschwindigkeit beträgt etwa 210 fps, ungefähr 90 % der maximalen Sättigung der Kamera wurden verwendet. Die Software EDAX OIM Data Collection (Version 7, 2015) kam zum Einsatz. Als Phasen wurden Ferrit und Austenit berücksichtigt. Auf die EBSD-Daten wurden ein Neighbor confidence index correlation ($CI \geq 0.01$) Cleanup und ein neighbor orientation correlation (5 ° grain tolerance angle) Cleanup angewandt (entweder in der Software OIM Analysis, Version 7, 2015 oder in der MATLAB Toolbox MTEX, Version 5.6.0), die sich ebenfalls für die betrachteten Gefüge in bisherigen Arbeiten in der Dillinger Grobblechforschung bewährt haben.

In den Kapiteln 6, 7 und 8 werden für die jeweiligen Datensätze die Parameter der Bildaufnahme kurz zusammengefasst.

5 Definition eines ganzheitlichen Ansatzes zur Anwendung von ML in MatWerk

Dieses Kapitel beleuchtet Unterschiede zwischen Gefügeaufnahmen und den typischerweise zum Entwickeln und Benchmarken von ML-Ansätzen verwendeten Bildern natürlicher Szenerien und zeigt, dass ML-basierte Auswertungen mehr sind als „nur ein ML Code“. Die Notwendigkeit, eine ML-basierte Auswertung materialwissenschaftlicher Aufgabenstellungen in einem ganzheitlichen Ansatz zu betrachten wird herausgearbeitet, und die in einem solchen Ansatz zu berücksichtigenden Schritte werden definiert und erläutert.

Die steigende Popularität von ML in der Gefügeanalyse wird u.a. an der steigenden Zahl an Publikationen deutlich. Derzeit scheinen aber viele Datenwissenschaftler auch ohne den entsprechenden materialwissenschaftlichen Hintergrund auf den Zug aufzuspringen, ML als Allheilmittel einzusetzen, allerdings ohne konstant die komplexen materialspezifischen Fragen genau zu erfassen. Durch diesen regelrechten Hype um ML finden sich jedoch zunehmend Arbeiten, die das materialwissenschaftliche Domänenwissen nicht nur vermissen lassen, sondern zu fragwürdigem Vorgehen aber auch expliziten Fehlaussagen und -Interpretationen führen. Zwar mögen die potenziellen negativen Auswirkungen in der Materialwissenschaft als weniger kritisch erscheinen als Fehlaussagen bspw. im autonomen Fahren oder in der medizinischen Diagnostik. Dennoch kann der aktuelle Hype um ML zu einem falschen Vertrauen in die Ergebnisse führen, da ML als Allheilmittel angesehen wird und das Zustandekommen der Ergebnisse nicht ausreichend hinterfragt wird. Langfristig, z.B. durch Einsatz von ML in der Qualitätskontrolle zur Freigabe von Bauteilen, könnte solch fragwürdiges Vorgehen auch zu wirtschaftlichen oder personenbezogenen Schäden führen.

Generell besteht lediglich ein kleiner Teil einer ML-basierten Auswertung, unabhängig von der Anwendung, aus dem ML-Code selbst [211]. Und bei der Bearbeitung von materialwissenschaftlichen Aufgabenstellungen ergeben sich zusätzliche Fragen und Herausforderungen, die aufmerksam beachtet werden müssen. Dies wird in Abbildung 5-1 illustriert. Sie zeigt einen plakativen Vergleich zwischen Bildern natürlicher Szenerien bzw. aus unserem Alltag und Gefügeaufnahmen. Als Beispiel für ersteres wurde eine Haustierklassifizierung gewählt, ein Beispiel, zu welchem es verschiedene Datensätze gibt, die auch zu Weiterentwicklung und Benchmarking von ML-Ansätzen verwendet werden [212,213]. Diese Bilder können i.d.R. einfach aufgenommen und über unser Allgemeinwissen beurteilt und Klassen zugeordnet werden. Gemäß Sculley et al. [211] sind aber auch bei diesen einfachen

Beispielen zusätzliche Aspekte zu berücksichtigen (in erster Linie hinsichtlich Datenmanagement und Recheninfrastruktur), sodass auch dort der letzte Anteil des ML-Algorithmus klein ist. Beim Übergang zu Gefügeaufnahmen ist bereits der Entstehungsprozess der Gefügeaufnahme deutlich komplexer. Probenentnahme, -präparation, -kontrastierung und die Abbildung mittels geeignetem Mikroskopieverfahren sind notwendig. Diese Schritte können einen signifikanten Einfluss auf das finale Erscheinungsbild des Gefüges in der Mikroskopaufnahme haben. Zusätzlich erfordert die Zuordnung der Grundwahrheit die Domänenexpertise. Dementsprechend sind bei materialwissenschaftlichen Fragestellungen zusätzlich zu den Aspekten gemäß [211] weitere Faktoren zu beachten (Abbildung 5-1, Abbildung 5-2).

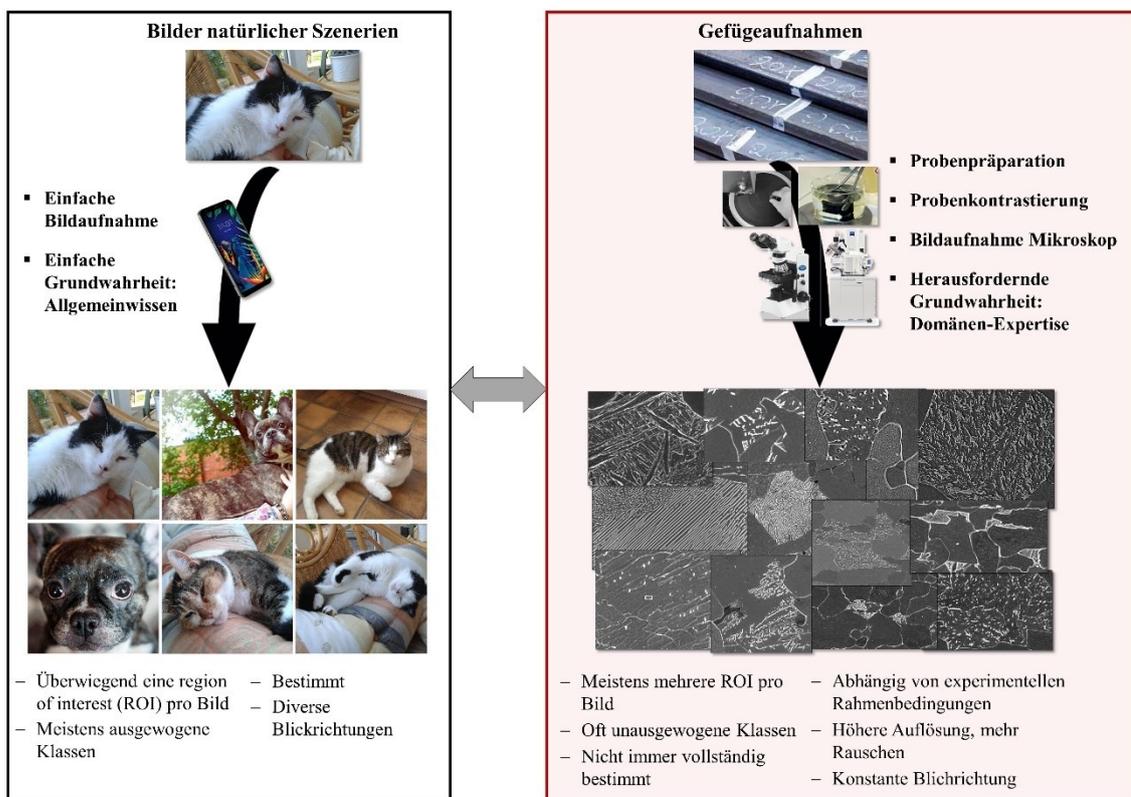


Abbildung 5-1: Visualisierung der Unterschiede zwischen Bildern natürlicher Szenarien und Gefügeaufnahmen sowie den bei materialwissenschaftlichen Fragestellungen zusätzlich zu berücksichtigenden Faktoren, nach [200].

Darüber hinaus existieren noch weitere relevante Unterschiede zwischen Gefügeaufnahmen und Bildern natürlicher Szenarien, bspw. die Anzahl von ROI im Bild, Klassenverteilungen, Auflösung und Rauschen oder die Betrachtungsrichtung. Der Einfluss all dieser Aspekte ist noch nicht vollständig aufgeklärt, allerdings erscheint es, dass insbesondere die größere Anzahl an ROI und die konstante Betrachtungsrichtung bei Gefügeaufnahmen einen Vorteil darstellen können [214]. Dies wird in Kapitel 8.2.2 erneut aufgegriffen und diskutiert.

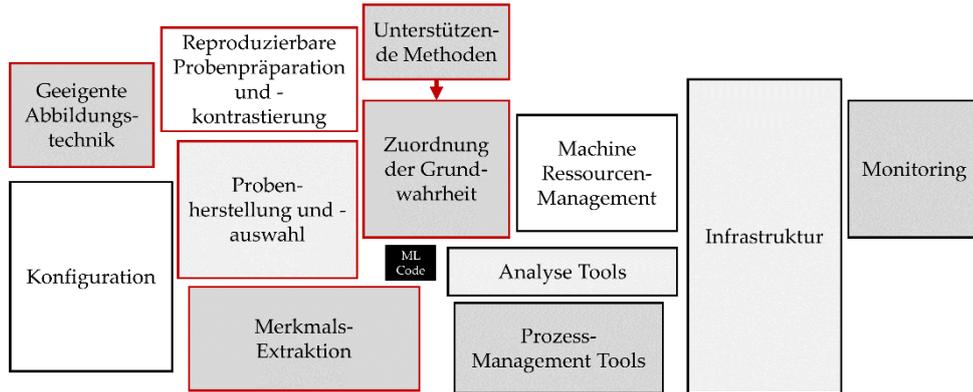


Abbildung 5-2: Visualisierung der bei ML für materialwissenschaftliche Fragestellungen zusätzlich zu berücksichtigenden Faktoren, nach [211] und [200].

Der Zuordnung der Grundwahrheit kommt bei einer ML-basierten Gefügeanalyse eine besondere Rolle zu. Nur eine objektive, reproduzierbare Zuordnung dieser Grundwahrheit ermöglicht den nachhaltig erfolgreichen Einsatz der ML-basierten Auswertung. Je komplexer die zu untersuchenden Gefüge, desto schwieriger wird die Vorgabe der Grundwahrheit, wenn sich der menschliche Experte ausschließlich auf das visuelle Erscheinungsbild der Gefüge verlassen muss, ein Aspekt, der von den verschiedenen menschlichen Experten in unterschiedlicher Weise wahrgenommen wird. In diesem Zusammenhang ist es wichtig, Gefügebildungen, Grundwahrheit und ML-Algorithmus nicht isoliert zu betrachten, sondern in einem ganzheitlichen Ansatz aufzufassen, bei dem zusätzlich auch alle Schritte hin zu einer Gefügebildung berücksichtigt werden. Ein solcher ganzheitlicher Ansatz ist in Abbildung 5-3 definiert und wird im Folgenden genauer beschrieben und diskutiert.

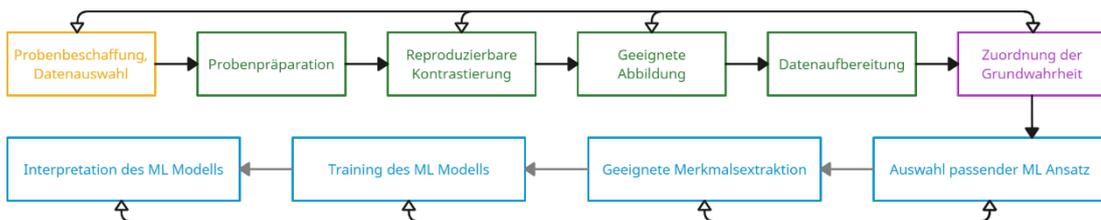


Abbildung 5-3: Darstellung des ganzheitlichen Ansatzes.

1) Probenbeschaffung und Datenauswahl

Grundlage für eine erfolgreiche Serienanwendung der ML-basierten Gefügeanalyse ist, dass die ausgewählten Trainingsdaten die gesamte benötigte Varianz an Gefügestrukturen abdecken. Idealerweise sollten für die spätere Zuordnung der Grundwahrheit klar zu trennende Gefüge ausgewählt werden. Ggfs. können dafür Referenzproben verwendet oder hergestellt werden.

Neben der Qualität der Daten ist für ML-basierte Auswertungen auch deren Quantität entscheidend.

2) Reproduzierbare Kontrastierung

Bekanntermaßen hat die Kontrastierung einen der stärksten Einflüsse auf das Erscheinungsbild des Gefüges. Dies betrifft einerseits verschiedene Ätzmittel, andererseits aber auch unterschiedliche Kontrastierungen mit demselben Ätzmittel, bspw. durch Variationen in Zeit, Temperatur oder Konzentration. Dementsprechend kann auch die Varianz der Gefügaufnahmen bei nur einem verwendeten Ätzmittel groß sein. Analog zur Probenauswahl gilt auch hier, dass die in einer Serienanwendung zu erwartende Varianz in den Trainingsdaten abgedeckt werden muss. Da eine zu große Varianz an Kontrastierungszuständen die erforderliche Datenmenge erhöht, ggfs. die Zuordnung der Grundwahrheit erschwert, und unter Umständen in einem einzigen ML-Modell gar nicht abzubilden ist, empfiehlt es sich, Anstrengungen zu unternehmen, um die Probenkontrastierung so stabil und reproduzierbar wie möglich zu gestalten. Eine gewisse Varianz muss von einem ML-Modell jedoch abgebildet werden können.

3) Geeignete Abbildung

Einerseits muss die Abbildungstechnik an die spätere Serienanwendung der ML-basierten Gefügeanalyse angepasst sein. D.h. falls bei einer Serienanwendung aus Zeitgründen lediglich die Lichtmikroskopie zum Einsatz kommen kann, wird dadurch die Abbildungstechnik vorgegeben. Andererseits gilt es zu bedenken, dass nicht alle Charakterisierungen, insbesondere die Lichtmikroskopie, vollständig deterministisch sind, und ggfs. weitere, detailliertere oder höher aufgelöste Untersuchungen notwendig sind, um Gefügestrukturen oder Sachverhalte komplett aufzuklären. Dies kann idealerweise in Form einer korrelativen Charakterisierung erfolgen, mit der durch die sensitiveren, höher aufgelösten Methoden Referenzen für die Serienanwendung mit der einfachsten Methode geschaffen werden (siehe Kapitel 6).

4) Datenaufbereitung

Bei der Datenaufbereitung sollten grundlegende Aspekte wie eine Histogramm-Normalisierung oder eine Shading-Korrektur bei ungleichmäßig ausgeleuchteten Gefügaufnahmen berücksichtigt werden. Im Falle einer korrelativen Charakterisierung müssen die Gefügaufnahmen der unterschiedlichen Quellen aufeinander registriert werden (siehe 2.2.2). An dieser Stelle kann auch eine explorative Datenanalyse mittels unüberwachtem ML zum Einsatz kommen (siehe 2.3.2). Diese kann ein besseres Verständnis der vorliegenden Daten ermöglichen, z.B. hinsichtlich Qualität und Trennbarkeit der Daten, oder auch das Entdecken von Ausreißern.

5) Zuordnung der Grundwahrheit

Dies betrifft zunächst die Auswahl des Klassifizierungsschemas und die Definition der Klassen sowie die letztliche Zuordnung zu den Klassen. Hier gibt es starke Interdependenzen insbesondere zur Probenauswahl und Bildaufnahme. Durch eine geschickte Probenauswahl oder die Herstellung von Referenzzuständen kann die Grundwahrheit bereits vorgegeben sein. Dies ist für nicht übermäßig komplexe Fragestellungen, bei denen das visuelle Erscheinungsbild der Gefüge ausreichend für eine einheitliche Beurteilung ist, möglich.

Sollten die Gefüge allerdings so komplex werden, dass bereits Uneinigkeit zwischen Experten besteht, sind Ringversuche ein probates Mittel zum Schaffen eines gemeinsamen Konsenses. Außerdem müssen ggfs. ergänzende Methoden zum Einsatz kommen, die nicht nur auf dem visuellen Erscheinungsbild der Gefüge beruhen. Dies betrifft in erster Linie eine korrelative Charakterisierung inklusive EBSD als ideale komplementäre Informationsquelle zu den Gefügeaufnahmen mittels LM oder REM.

6) Auswahl des passenden ML-Ansatzes

Dies betrifft im Wesentlichen die Entscheidung zwischen konventionellem ML und DL, und hat dadurch naturgemäß Wechselwirkungen mit der Merkmalsextraktion und der Interpretierbarkeit. Eine pauschale Empfehlung für ML oder DL ist in den seltensten Fällen möglich. Zu berücksichtigende Aspekte sind die vorhandene bzw. benötigte Datenmenge, die Verfügbarkeit an Rechenkapazität oder die Komplexität des Vorhabens. DL bietet zwar den Vorteil, dass das CNN auch den Prozess der Merkmalsextraktion selbst erlernt, allerdings sind die überwiegend abstrakten Merkmale des CNN schwieriger zu interpretieren.

7) Geeignete Merkmalsextraktion

Im Falle des konventionellen ML ist ein manuelles Feature Engineering notwendig. Zur Identifizierung geeigneter Merkmale wird die materialwissenschaftliche Domänenexpertise benötigt.

8) Training des ML-Modells

Zum Training eines ML-Modells stehen diverse Werkzeuge aus der Informatik zur Verfügung, die mit deren „best practices“ angewandt werden können. Wurden die vorherigen Aspekte sorgsam bedacht, können etablierte, verstandene und robuste Ansätze aus der Informatik i.d.R. verhältnismäßig einfach und unkompliziert zum Einsatz kommen.

9) Interpretation des ML-Modells

Es ist immens wichtig, zu versuchen, das ML-Modell zu verstehen. Dies betrifft einerseits die für das ML-Modell entscheidenden Merkmale, aber insbesondere auch die Betrachtung der

Fehlklassifizierungen. Dadurch werden Rückschlüsse auf praktisch alle vorherigen Schritte möglich.

Aufgrund der oft intransparenten Entscheidungsfindung von ML-Modellen werden sie oft als eine „Blackbox“ betrachtet. Oft scheint diese Blackbox-Natur der ausschlaggebende Grund zu sein, Methoden des ML in der Materialwissenschaft nicht einzusetzen [215]. Generell gibt es in der Informatik-Community aktuell starke Bestrebungen, erklärbare ML-Algorithmen und -Modelle zu erlangen (engl. „explainable AI“). Lösung und Entscheidungsfindung sollen dabei vom Menschen verstanden werden können. Daher ist es auch für die Akzeptanz von ML in der Community der Materialwissenschaft extrem wichtig, die jeweiligen ML-Modelle zu verstehen und zu interpretieren. Dabei sollte auch angestrebt werden, aus den ML-Modellen auch materialwissenschaftliche Rückschlüsse ziehen zu können.

Die beschriebene ganzheitliche Betrachtung stellt nicht nur die Grundlage für die erfolgreiche Umsetzung der ML-Klassifizierung und -Segmentierung in den späteren Kapiteln dar, sie kann auch die Basis bilden für spätere Implementierungen in Forschung oder Qualitätskontrolle. Eine Schlüsseltechnik stellt die korrelative Charakterisierung aus LM, REM und EBSD dar, die in Kapitel 6 entwickelt wird, und eine kombinierte Gefügequantifizierung aus Mikroskopaufnahmen und den EBSD-Messdaten ermöglichen soll. Durch diese korrelative Charakterisierung, in Kombination mit einem Fokus auf reproduzierbare Kontrastierung, können sog. „rich data“ generiert werden. „Rich“ bezieht sich dabei auf qualitativ hochwertige und multimodale Daten, die für die Anwendung von ML einen entscheidenden Mehrwert darstellen können. Die korrelative Charakterisierung ermöglicht es außerdem, die einfachste Charakterisierung für eine Serienauswertung zu erschließen. In den Fallstudien zur Auswertung bainitischer Gefüge in den Kapiteln 7 und 8 werden die vorher definierten Schritte des ganzheitlichen Ansatzes in Bezug auf die ML-Klassifizierung und Segmentierung anschließend umfangreich diskutiert.

6 Skalenübergreifende Gefügequantifizierung mittels korrelativer Mikroskopie

In der bestehenden Literatur wird im Großteil der Veröffentlichungen die Bild-Registrierung, die einen, wenn nicht sogar den grundlegenden Schritt einer quantitativen korrelativen Auswertung darstellt, nicht spezifiziert. Dies legt nahe, dass viele Auswertungen lediglich qualitativ durch Vergleiche der Aufnahmen der separaten Untersuchungen erfolgen, ohne dass die Daten wirklich in einem einzigen „Format“ und deckungsgleich zusammengeführt wurden.

Für die in dieser Arbeit zu entwickelnde Methodik zur korrelativen Charakterisierung aus LM, REM und EBSD werden daher folgende Zielsetzungen ausgegeben: (1) Die Definition des experimentellen Ablaufs. (2) Nicht nur die aus einer EBSD-Software exportierten EBSD-Karten, sondern die tabellarischen EBSD-Messdaten auswertbar zu machen, indem sie mit den Gefügaufnahmen zusammengeführt und registriert werden. (3) Eine Auswertung zu ermöglichen, die nicht nur den gesamten Messbereich betrachtet, sondern auch beliebige separate ROI. Darüber soll eine kombinierte Quantifizierung auf den Ebenen LM, REM und EBSD realisiert werden.

Die Vor- und Nachteile von LM, REM und EBSD wurden bereits in Kapitel 2.2.2 dargelegt. Durch den korrelativen Ansatz wird es möglich, Vorteile zu kombinieren und Nachteile zu eliminieren, sowie Informationen aus verschiedenen Längenskalen und unterschiedlichen, sich ergänzenden Informationsquellen zusammenzuführen. In diesem Fall würde dies z.B. eine Kombination aus einfacher Segmentierung der LM-Aufnahme, der hohen Auflösung der Substruktur der REM-Aufnahme und Informationen über Phasen, Grenzflächen oder Missorientierungen aus der EBSD-Messung bedeuten. Abbildung 6-1 zeigt eine Visualisierung dessen durch Kombination registrierter LM-, REM- und EBSD-Aufnahmen in einem Bild. Darüber hinaus ist es immer das Ziel, durch den korrelativen Ansatz Referenzen zu schaffen, d.h. durch die gewonnenen Erkenntnisse der höher aufgelösten, detaillierteren Methoden (REM, EBSD) Rückschlüsse für die einfachste Charakterisierungsmethode (LM) zu ziehen, um zukünftige Untersuchungen auf diese zu reduzieren.

In diesem Kapitel wird als erstes die experimentelle Vorgehensweise zur korrelativen Charakterisierung aus LM, REM und EBSD definiert. Dabei wird auch die Wahl der geeigneten Probenkontrastierung als Grundlage einer automatisierten Bild-Registrierung erörtert. Zunächst werden Möglichkeiten zur qualitativen Auswertung gezeigt. Diese betrifft das Überlagern von LM- oder REM-Aufnahmen mit EBSD-Karten. Anschließend werden Möglichkeiten und Herausforderungen der quantitativen Auswertung, bei der nicht nur EBSD-Karten, sondern die tatsächlichen EBSD-Messwerte betrachtet werden, vorgestellt und am Beispiel bainitischer

Stahlgefüge visualisiert. Der Großteil der folgenden Ausführungen wurde bereits im Journal Praktische Metallographie veröffentlicht [201].

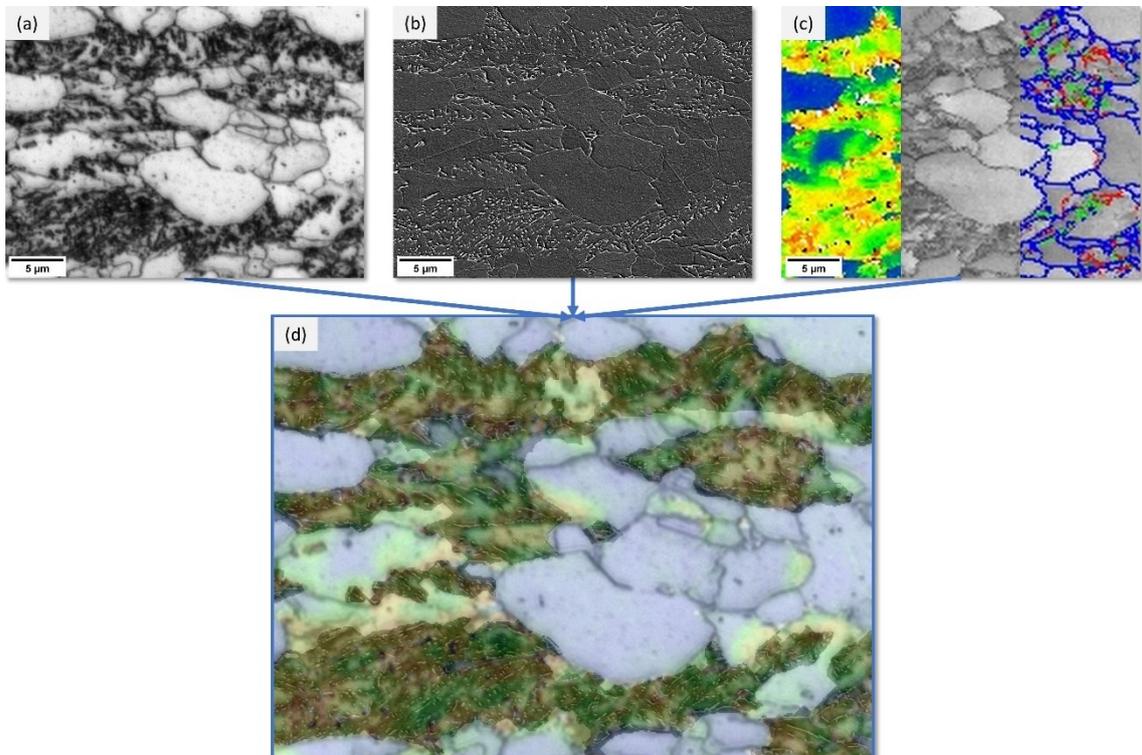


Abbildung 6-1: Visualisierung der korrelativen Charakterisierung. (a) korrelative LM-Aufnahme. (b) korrelative REM-Aufnahme. (c) korrelative EBSD-Messung mit KAM (links), IQ (mittig) und Grenzflächen (rechts). (d) Kombination von LM, REM und KAM in einem Bild zur Visualisierung der korrelativen Charakterisierung und dem Zusammenführen der Informationen aus unterschiedlichen Untersuchungsmethoden.

6.1 Experimenteller Ablauf

Der experimentelle Ablauf ist in Abbildung 6-2 dargestellt und wird in den folgenden Abschnitten erläutert.



Abbildung 6-2: Experimenteller Ablauf der korrelativen Charakterisierung.

Die Präparation der Proben erfolgte wie in Kapitel 4.4. Für eine korrelative Charakterisierung wurde zunächst die zu untersuchende ROI markiert, damit diese sowohl bei der EBSD-Messung als auch den Abbildungen in REM und LM gefunden wird. Dafür wurden Härteeindrücke in Form eines gleichschenkligen Dreiecks aus HV0,3 Eindrücken verwendet, mit einer Basis und Höhe von jeweils 300 µm. Die Markierung kann vor oder nach der Präparation geschehen.

Als erstes wurde die EBSD-Messung durchgeführt, da sie gewöhnlicherweise an einer nicht geätzten Probenoberfläche erfolgt. Die Messungen erfolgten wie in Kapitel 4.6 beschrieben. Nach der EBSD-Messung ist eine Kontrastierung der Probe für die LM- und REM-Aufnahmen erforderlich. Die aus der EBSD-Messung resultierende leichte Kohlenstoff-Kontamination der Oberfläche in der ROI kann eine Ätzung unter Umständen negativ beeinflussen. Daher empfiehlt sich vor der Ätzung eine kurze feine Politur (z.B. OP-S oder mit 0.25 oder 1 μm Diamantsuspension), wenige Sekunden und bei niedrigem Druck, zur Entfernung der Kontamination. Eine zu lange Politur und damit unnötiger Materialabtrag gilt es unbedingt zu vermeiden, da die ROI ansonsten nicht mehr in derselben Schliffebene betrachtet werden würde. Die Wahl der Ätzung hat Einfluss auf die spätere Registrierung der LM-, REM- und EBSD-Aufnahmen mittels SIFT und bUnwarpJ. Damit mittels SIFT automatisch gemeinsame Merkmale in LM bzw. REM-Aufnahme und EBSD-Karten gefunden werden, müssen diese einen ähnlichen Kontrast aufweisen. Dies bedeutet einerseits, dass eine Darstellung der EBSD-Messung gewählt werden muss, die dem visuellen Erscheinungsbild des Gefüges in LM und REM ähnelt. Dafür bieten sich Parameter, die die Qualität der Pattern oder Messung ausdrücken, bspw. IQ, CI o.ä. an. Andererseits sollte auch die Ätzung so gewählt werden, dass der durch die Ätzung entstehende Kontrast möglichst ähnlich zu der IQ- oder CI-Karte ist. Dies ist wiederum abhängig von den vorliegenden Gefügen. Beim einem Zweiphasenstahlgefüge aus polygonalem Ferrit und einer Zweitphase aus Martensit oder feinen bainitischen Strukturen weist die IQ-Karte zusätzlich zur Kontrastierung der Korngrenzen einen starken Kontrast der Zweitphase auf. Daher werden in IQ-Karte und der LM-Aufnahme nach modifizierter Beraha Ätzung, die nur die Zweitphase und nicht die Ferritkorngrenzen angreift, mittels SIFT leicht gemeinsame Merkmale gefunden (Abbildung 6-3a).

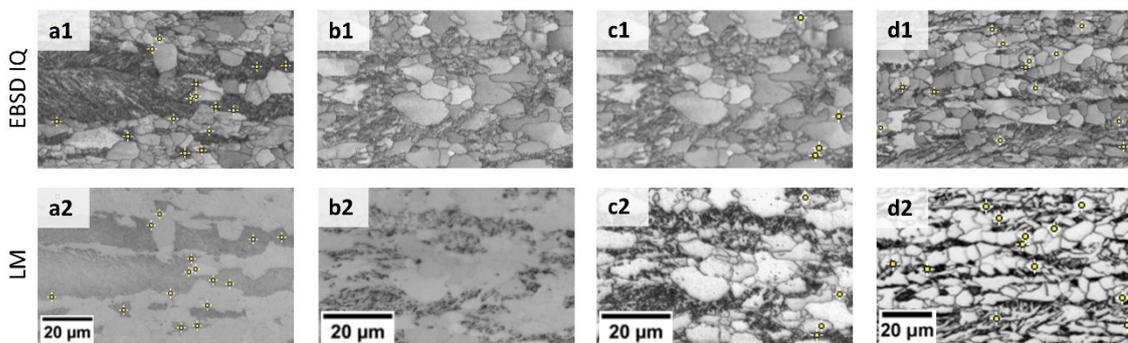


Abbildung 6-3: (a1, 2): Starker Kontrast der Zweitphase in der IQ: gemeinsame SIFT-Merkmale werden gefunden (gelbe Kreuze). (b1, 2): Schwächerer IQ-Kontrast der Zweitphase: nach modifizierter Beraha Ätzung werden keine SIFT-Merkmale gefunden. (c1, 2): Selbe Probenstelle wie (b1, 2): Durch die Korngrenzenkontrastierung nach Nital Ätzung werden SIFT-Merkmale gefunden. (d1, 2): Gemeinsame SIFT-Merkmale in Multiphasenstahlgefüge nach Nital Ätzung. Modifiziert nach [201].

Eine grobe bainitische oder eine perlitische Zweitphase ergibt in der IQ-Karte allerdings nur einen geringen Kontrast, während die Korngrenzen weiterhin klar dargestellt werden. In einer LM-Aufnahme nach modifizierter Beraha Ätzung werden nun keine gemeinsamen Merkmale gefunden, da der Kontrast zu gegensätzlich ist (LM: nur Zweitphase kontrastiert, IQ: fast nur Korngrenzen, Abbildung 6-3b). Wird das Gefüge stattdessen mit Nital geätzt, wird eine ausgeprägte Kontrastierung der Korngrenzen erreicht, wodurch mittels SIFT wiederum gemeinsame Merkmale gefunden werden (Abbildung 6-3c). Da Multiphasenstahlgefüge aufgrund der kleinen und fein verteilten Zweitphase-Partikel ebenfalls nur einen geringen Kontrast der Zweitphase in der IQ-Karte zeigen, empfiehlt sich für diese Gefügetypen auch eine Nital Ätzung (Abbildung 6-3d).

Nach geeigneter Kontrastierung erfolgte die Bildaufnahme in LM und REM. Vergrößerungen und Auflösungen sind abhängig von der ROI und dem Untersuchungsziel. Zur Erfassung der gesamten ROI mussten sowohl im LM als auch im REM mehrere Bilder aufgenommen werden. Die Aufnahmen erfolgten manuell mit einem gewissen Überlapp. Anschließend wurden die Einzelbilder aus LM und REM mit Hilfe geeigneter Bildverarbeitungssoftware (z.B. ImageJ oder Microsoft Image Composite Editor) zu je einer einzelnen großen Aufnahme zusammengesetzt.

6.2 Qualitative Auswertung

Zur qualitativen Auswertung werden die Darstellungen verschiedener EBSD-Parameter, wie sie mit üblichen EBSD-Auswertprogrammen als farbige Karten im Bildformat exportiert werden können, verwendet. In diesen Beispielen wurde die Software TSL OIM Analysis (Version 7, 2015) verwendet. Vorab ist anzumerken, dass die Bild-Registrierung generell auf die höher aufgelöste Aufnahme erfolgen sollte, da ansonsten bei der Registrierung eines höher aufgelösten Bildes auf ein niedriger aufgelöstes Bild Auflösung und damit wertvolle Informationen verlören gingen. Die Registrierung für eine qualitative Auswertung läuft wie folgt ab (Abbildung 6-4).

Zunächst wird die LM-Aufnahme auf die REM-Aufnahme registriert. Damit mittels SIFT in beiden Aufnahmen gemeinsame Merkmale gefunden werden, muss derselbe hell-dunkel Kontrast vorliegen [50]. Dafür wird die LM-Aufnahme invertiert. Anschließend werden mittels SIFT gemeinsame Merkmale gefunden, die für die Registrierung mittels bUnwarpJ verwendet werden. Nach der Registrierung wird die LM-Aufnahme erneut invertiert, um den originalen Kontrast wiederherzustellen. Die bei der Registrierung berechnete Transformationsmatrix kann abgespeichert werden. Damit kann auch eine segmentierte LM-Aufnahme auf die REM-Aufnahme registriert werden.

Nun erfolgt die Registrierung der EBSD IQ-Karte auf die bereits registrierte LM-Aufnahme, erneut mittels SIFT und bUnwarpJ. Auch hier wird die Transformationsmatrix wieder abgespeichert. Über sie können im Anschluss alle weiteren gewünschten EBSD-Karten registriert werden.

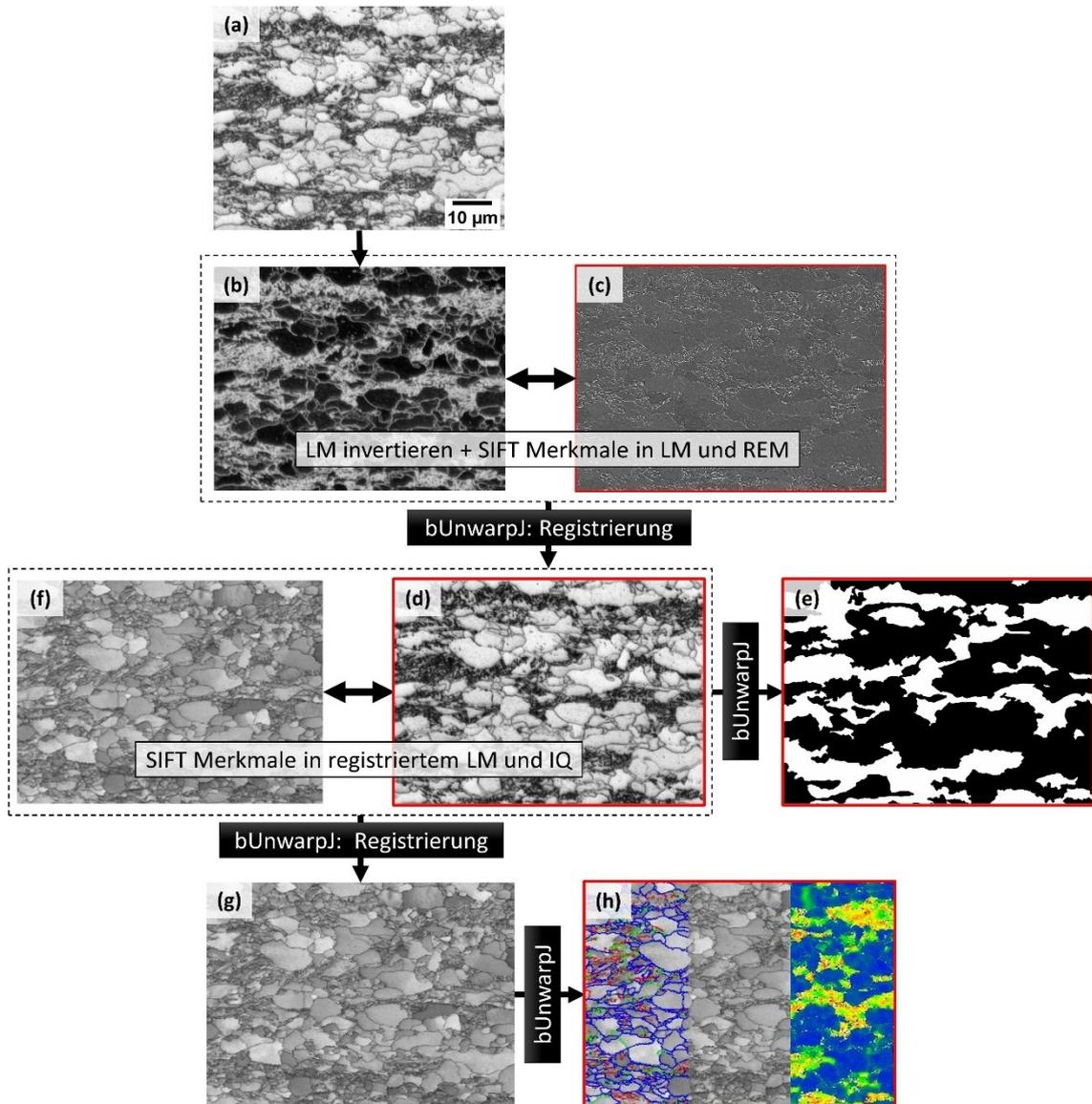


Abbildung 6-4: Ablauf einer Registrierung von LM- und REM-Aufnahmen sowie EBSD-Karten: LM-Aufnahme (a) wird invertiert (b). SIFT-Merkmale in LM- und REM-Aufnahme (c), die mittels bUnwarpJ zur Registrierung der LM- auf die REM-Aufnahme genutzt werden (d). Über die Transformationsmatrix aus bUnwarpJ kann auch eine segmentierte LM-Aufnahme registriert werden (e). EBSD IQ (f) wird über SIFT und bUnwarpJ auf die auf die REM-Aufnahme registrierte LM-Aufnahme registriert (g). Über die Transformationsmatrix aus bUnwarpJ werden weitere EBSD-Karten ebenfalls registriert (h). Rot umrandet: Satz aufeinander registrierter Aufnahmen. Modifiziert nach [201].

Beim SIFT-Algorithmus sollte für den Parameter „expected transformation“ die Einstellung „Similarity“ oder „Affin“ gewählt werden. Bei den weiteren Parametern haben sich die Voreinstellungen bewährt. Sollten trotz gleichartigen Kontrasts der Aufnahmen zunächst keine

gemeinsamen SIFT-Merkmale gefunden werden, kann dies durch eine Anpassung von Helligkeit und Kontrast der Aufnahmen oder durch einen höheren Wert für den Parameter „maximal alignment error“ korrigiert werden. Auch bei der Registrierung mittels bUnwarpJ haben sich die voreingestellten Standardwerte bewährt. Als Target Image sollte die Aufnahme mit der höheren Auflösung gewählt werden.

Die einfachste Form der Weiterverarbeitung ist die Überlagerung verschiedener Aufnahmen, also LM- oder REM-Aufnahme, mit EBSD-Karten. Auf diese Weise können die Informationen aus den unterschiedlichen Abbildungsverfahren in einer Darstellung kombiniert werden. Insbesondere EBSD liefert einen ganz anderen Satz an Informationen, z.B. Missorientierungsparameter und Daten über Korn- oder Phasengrenzen, die die LM- und REM-Aufnahmen ideal ergänzen und ein besseres Verständnis und Beurteilung der Gefüge erlauben. Abbildung 6-5 zeigt als Beispiel die Überlagerung der REM-Aufnahmen mit den Grenzflächenarten der EBSD-Messung für verschiedene bainitische Strukturen in Zweiphasenstählen. Sub-Korngrenzen sind rot dargestellt, Kleinwinkelkorngrenzen grün und Großwinkelkorngrenzen blau. Durch die verschiedenen Anteile und Dichten der Grenzflächen ist eine bessere Beurteilung der bainitischen Strukturen möglich, bspw. eine fundierte Unterscheidung von oberem und unterem Bainit, falls dies rein über die Karbid-Anordnung und -Morphologie nicht möglich ist. Dies wird in Kapitel 7.2.2.2 erneut aufgegriffen.

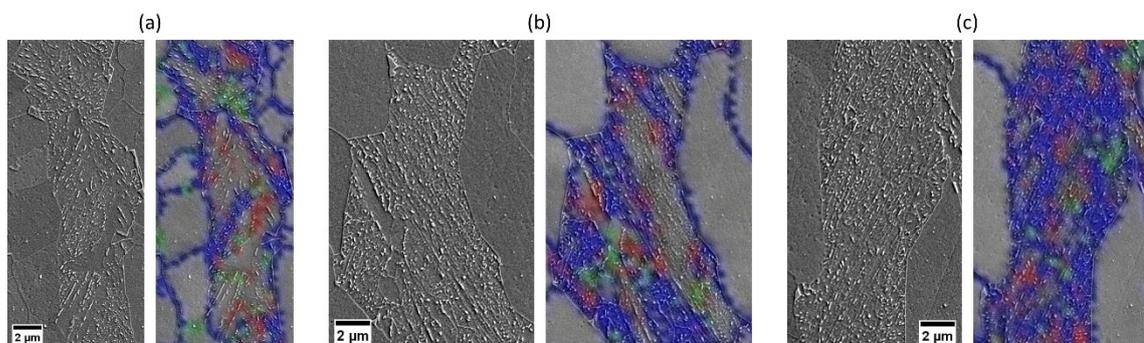


Abbildung 6-5: jeweils REM-Aufnahme und Überlagerung von REM-Aufnahme mit EBSD Grenzflächen-Karte (Sub-Korngrenzen 2-5 °: rot, Kleinwinkelkorngrenzen 5-15 °: grün, Großwinkelkorngrenzen > 15 °: blau). (a) oberer Bainit. (b) Mischung aus oberem und unterem Bainit. (c) unterer Bainit. Modifiziert nach [200].

6.3 Quantitative Auswertung

Ziel ist eine kombinierte Quantifizierung der licht- und rasterelektronenmikroskopischen Aufnahmen sowie der tabellarischen EBSD-Messwerte. Im Bildformat exportierte EBSD-Karten enthalten zwar auch die tatsächlich gemessenen Daten, lediglich als Bild kodiert, aber wenn die Daten in tabellarischer Form mitgeführt werden, erlaubt das größere Möglichkeiten der

Auswertung. Die Aufbereitung der EBSD-Daten und anschließende Auswertung erfolgt mit MATLAB und der MATLAB Toolbox MTEX [216] (Version 5.6.0). Da nun Bildformate mit tabellarischen Messdaten verknüpft werden, muss der Ablauf der Registrierung angepasst werden.

Da die Transformationsmatrix aus bUnwarpJ nicht ohne Weiteres aus ImageJ auf die in MATLAB vorliegenden Datenarrays der EBSD-Parameter anwendbar ist, kann der Ablauf der qualitativen Auswertung nicht übernommen werden. Stattdessen werden die EBSD-Daten als Target verwendet und die Mikroskop-Aufnahmen darauf registriert. Die Datenaufbereitung und Registrierung für die quantitative Auswertung werden im Folgenden lediglich vereinfacht zusammengefasst. Eine detaillierte, schrittweise Beschreibung findet sich im Anhang (10.4).

Die EBSD-Daten liegen nach dem Import in MTEX in Form einer tabellarischen Liste vor. Zunächst werden sie in das korrekte, benötigte Format überführt, d.h. in eine Matrixdarstellung, wie auch ein Bild vorliegt. Diese Matrixdarstellung der EBSD-Daten wird für alle gewünschten EBSD-Parameter erzeugt, die anschließend als multidimensionales Array kombiniert werden. Die LM- und REM-Aufnahme werden nun auf dieses Datenarray registriert, da dies einfacher umzusetzen ist als das Datenarray auf Mikroskop-Aufnahmen zu registrieren. D.h. das EBSD-Datenarray ist jetzt das Target, auf das registriert wird. Dafür muss nun die Verbindung zwischen Datenarray und Mikroskopaufnahmen hergestellt werden. Dafür wird ein geeigneter EBSD-Parameter des Datenarrays (wiederum die IQ, wie in 6.2) als Grauwertbild exportiert. Jetzt können erneut die etablierten Abläufe der Bild-Registrierung mittels SIFT und bUnwarpJ angewendet werden (siehe 6.2). Die LM-Aufnahme wird jetzt auf diese exportierte IQ-Karte registriert. Erneut wird die Transformationsmatrix abgespeichert, um eine segmentierte LM-Aufnahme ebenfalls registrieren zu können. Anschließend wird die REM-Aufnahme auf die bereits registrierte LM-Aufnahme registriert.

Generell muss berücksichtigt werden, dass die „Auflösung“ des EBSD-Datenarrays, bestimmt durch die Schrittweite der EBSD-Messung, i.d.R. geringer ist als die Auflösung der REM-Aufnahme und ggfs. auch geringer als die der LM-Aufnahme. Bei einer Registrierung einer hochaufgelösten REM-Aufnahme auf das EBSD-Datenarray würde folgerichtig Auflösung und damit die wertvollen Informationen über die Substruktur der Gefüge verloren gehen. Dies kann durch ein Umskalieren verhindert werden, das ebenfalls im Detail im Anhang beschrieben wird (10.4).

In den folgenden Beispielen wurden diese EBSD-Parameter berücksichtigt: IQ, CI, KAM 1. Ordnung, KAM 3. Ordnung, GAM und Grain Orientation Spread (GOS). Für eine Erklärung dieser Parameter wird auf den Standardwerke verwiesen [216,217].

Wenn die originalen Messwerte, d.h. die Eulerwinkel, im Datenarray mitgeführt werden, können daraus jederzeit noch weitere Parameter bestimmt werden, u.a. auch Korngrenzen. Dies ist allerdings mit einem signifikanten Berechnungsaufwand und manueller Programmierung verbunden, sodass der Einfachheit halber manche Parameter weiterhin als EBSD-Karte im Bildformat mitgeführt werden können. Dabei handelt es sich um Darstellungen der Korngrenzen: einerseits alle Korngrenzen mit Grenzwinkel 5° , andererseits eine Darstellung von Sub-, Kleinwinkel- und Großwinkelkorngrenzen (Abbildung 6-6). Diese können weiterhin aus TSL OIM Analysis oder über MTEX erstellt werden.

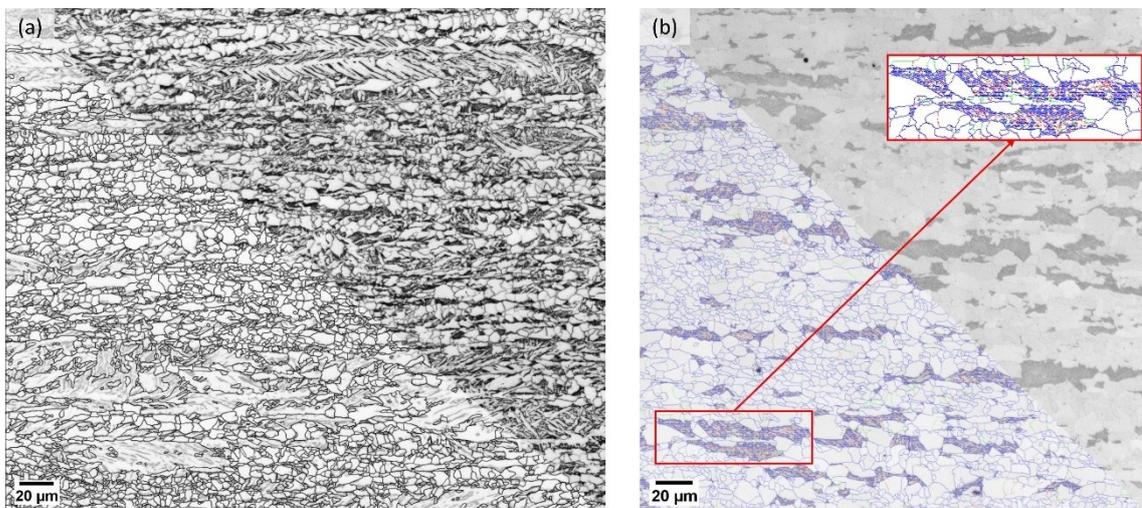


Abbildung 6-6: EBSD-Karten im Bildformat für weitere Quantifizierungen. (a) Korngrenzen- Karte (Grenzwinkel 5°). (b) Karte der Korngrenzenarten: Sub-Korngrenzen ($2-5^\circ$, rot), Kleinwinkelkorngrenzen ($5-15^\circ$, grün) und Großwinkelkorngrenzen ($> 15^\circ$, blau).

Der beschriebene Ablauf ermöglicht das Zusammenführen und Registrieren der Mikroskopaufnahmen aus LM und REM sowie der Daten der EBSD-Messung. Darüber wird eine kombinierte Gefügequantifizierung auf LM-, REM- und EBSD-Ebene möglich. Die Quantifizierung kann pixelweise oder objektweise erfolgen. Im Falle von Zweiphasenstählen ist eine objektweise Quantifizierung einzelner Zweitphase Objekte naheliegend. In Vorarbeiten [50] wurde eine objektweise Auswertung der kohlenstoffreichen Zweitphase-Objekte bereits für die LM- und REM-Aufnahme etabliert. Dabei dient die segmentierte LM-Aufnahme als binäre Maske, mit der in der LM- und REM-Aufnahme einzelne Objekte definiert und extrahiert werden, und von diesen Objekten in der Folge separat Merkmale berechnet werden. Von der LM-Aufnahme werden die Objektmorphologie sowie die Bild-Textur der Substruktur innerhalb des Objektes erhoben. Von der REM-Aufnahme werden ebenfalls die Bild-Textur der Substruktur sowie deren Morphologie berechnet.

Analog wurde eine **objektweise Auswertung der EBSD-Daten** ergänzt. Von den gewünschten EBSD-Parametern werden alle Werte eines Parameters pro Objekt extrahiert. Davon werden Minimum, Maximum, Mittelwert, Median und Standardabweichung berechnet. Um komplexere Werteverteilungen in den Objekten zu bestimmen, als mit den gerade genannten Kenngrößen möglich ist, können die Werte im Objekt auch als Grauwerte interpretiert und davon ebenfalls Texturparameter (siehe 2.2.4) erhoben werden. Dadurch können bspw. die in der IQ-Karte teilweise sichtbaren Substrukturen oder C-reichen Zweitphasen besser erfasst werden als über die einfachen Statistiken der Werteverteilung, welche keine räumliche Anordnung im Objekt berücksichtigen können. Auch für die kornbasierten Missorientierungsparameter (GAM, GOS) werden Maximum (Max), Minimum (Min), Mittelwert (MW), Median (MD) und Standardabweichung (SD) erhoben, da es aufgrund der Interpolation bei der Aufbereitung der EBSD-Daten zu geringen Unterschieden in den Werten pro Korn kommt (siehe 10.4).

Weiterhin können über die Grain Boundary Karte Grenzflächenarten und die Grenzflächendichte im Objekt bestimmt werden. Dies ist aktuell noch nicht durch eine direkte Auswertung der EBSD-Daten implementiert, sondern über eine Auswertung der Grain Boundary Karte im RGB-Bildformat. Über ein Color Thresholding können der rote (Sub-Korngrenzen), grüne (Kleinwinkel-Korngrenzen) und blaue (Großwinkel-Korngrenzen) Farbkanal separat ausgewertet werden. Außerdem ist es möglich, die KAM-Werte in der Ferrit-Matrix um ein Zweitphase-Objekt herum zu ermitteln (Abbildung 6-7). Dazu wird aus der Objekt-Maske automatisch eine zweite Maske generiert, die nur die Umgebung des Objektes berücksichtigt. Analog zur vorherigen Auswertung werden auch hier Minimum, Maximum, Mittelwert, Median und Standardabweichung der KAM Werte berechnet.

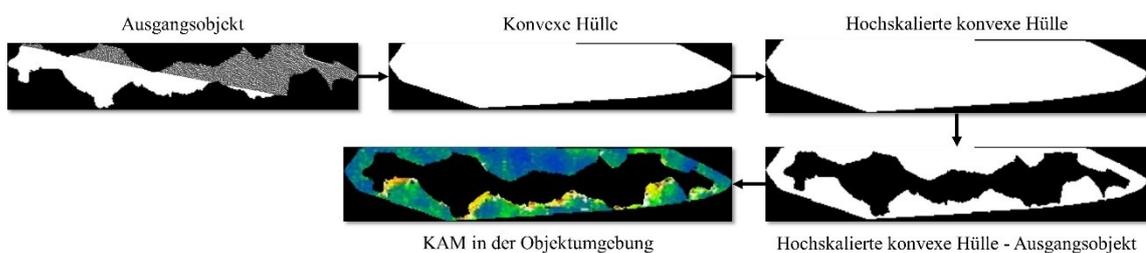


Abbildung 6-7: Quantifizierung der KAM Werte in der Ferritmatrix um ein Zweitphase-Objekt. (a) Ausgangsobjekt. (b) Konvexe Hülle um das Ausgangsobjekt. (c) diese konvexe Hülle wird hochskaliert (Faktor 1,2). (d) von der hochskalierten konvexen Hülle wird das Ausgangsobjekte subtrahiert. Es verbleibt eine Maske, die lediglich die Objektumgebung erfasst. (e) diese Maske ermöglicht die Bestimmung der KAM Werte in der Ferritmatrix um das Objekt.

Abbildung 6-8 visualisiert die gesamten **Auswertemöglichkeiten für ein Zweiphasenstahlgefüge auf LM-, REM- und EBSD-Ebene.**

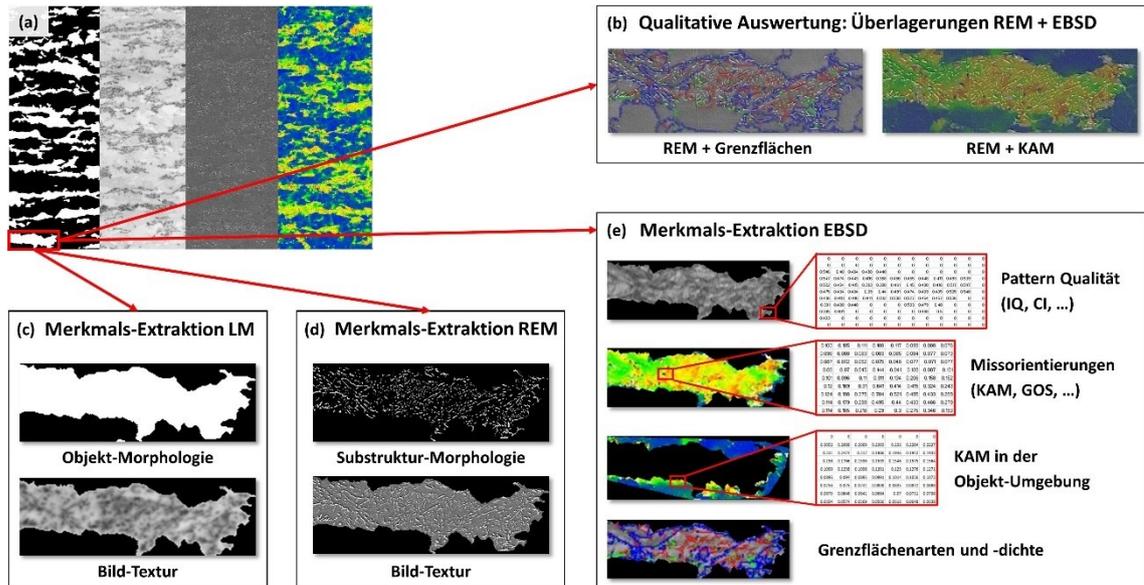


Abbildung 6-8: Objektweise Quantifizierung der korrelativen Daten. (a) Satz registrierter Aufnahmen und Daten: segmentierte LM-Aufnahme, LM- und REM-Aufnahme sowie EBSD-Daten in Form eines multidimensionalen Daten-Arrays. Die segmentierte LM-Aufnahme wird zur Objektdefinition und objektweisen Quantifizierung genutzt. (b) Qualitative Auswertung: LM- oder REM-Aufnahme mit gewünschten EBSD-Karten überlagern. (c-e) Quantifizierung: auf LM-, REM- sowie EBSD-Datenebene können eine Vielzahl an Gefügemerkmalen erhoben werden. Maßstabsbalken werden der Übersichtlichkeit wegen nicht dargestellt. Modifiziert nach [201].

Analog zur Auswertung der Zweiphasengefüge ist auch eine objektweise Auswertung der Multiphasenstahlgefüge möglich. Die Objekte sind dort dann nicht mehr Zweitphase-Objekte, sondern die durch die EBSD-Messung mit einem Grenzwinkel von 5° definierten Körner. Abbildung 6-9 visualisiert die **Auswertemöglichkeiten für ein Multiphasenstahlgefüge auf LM- und EBSD-Ebene**. Es werden jeweils ein polygonales Ferritkorn und ein bainitisches Objekt gezeigt. Dabei wird bereits deutlich, inwieweit die betrachteten Parameter für die spätere Unterscheidung von bainitischem und polygonalem Ferrit geeignet sind (siehe 8.3).

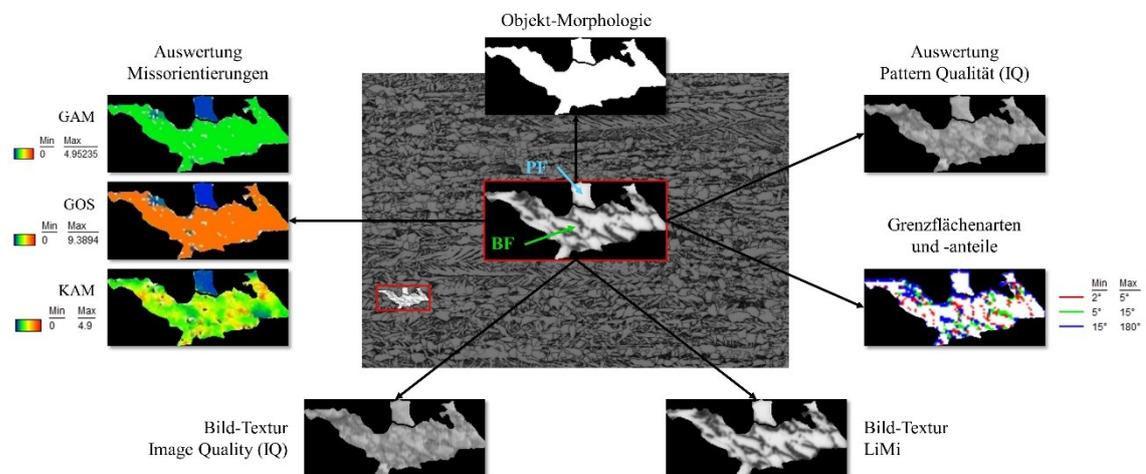


Abbildung 6-9: Visualisierung geeigneter Parameter zur Unterscheidung von bainitischem und polygonalem Ferrit und deren Unterschiede am Beispiel von je einem Objekt bainitisches sowie polygonalen Ferrits.

Statt einer objektweisen Auswertung ist bei beiden Stahlgefügen auch eine **pixelweise Auswertung der EBSD-Daten** möglich. Wohingegen ein Objekt mehrere Pixel und Werte enthält, hat ein Pixel jeweils nur einen Wert pro Parameter, wodurch nur vereinfachte, reduzierte Auswertungen möglich sind. Eine Berücksichtigung komplexerer Parameter bzw. Parameter, die auch räumliche Informationen und Abhängigkeiten berücksichtigen, wie bei der objektweisen Auswertung, ist damit nicht möglich. Tabelle 6-1 stellt die mittels pixel- und objektweiser Auswertung zugänglichen Parameter gegenüber. Die letztlichen Auswertungen sind in automatisierten MATLAB-Skripten realisiert.

Tabelle 6-1: Liste extrahierter Parameter der pixelweisen- und objektweisen Auswertung.

Pixelweise		Objektweise	
Parameter	Anzahl Werte	Parameter	Anzahl Werte
IQ	1	IQ	5 (Max, Min, MW, MD, SD)
CI	1	CI	5
GAM	1	GAM	5
GOS	1	GOS	5
KAM 1. Ordnung	1	KAM 1. Ordnung	5
KAM 3. Ordnung	1	KAM 3. Ordnung	5
		IQ Texturauswertung	21
		Objektmorphologie	11
		Grenzflächenarten	3
		Grenzflächendichte	2
Gesamt	6	Gesamt	67

6.4 Zusammenfassung

Eine Methodik zur korrelativen Charakterisierung bestehend aus LM, REM und EBSD, inklusive definierter experimenteller Schritte, die sowohl qualitative als auch quantitative Auswertungen ermöglicht, wurde vorgeschlagen. Die Methodik baut auf den Vorarbeiten von Britz et al. [50] auf. Ein entscheidender Mehrwert verglichen mit dem Stand der Technik, in dem öfter nur qualitative Vergleiche zwischen Messverfahren stattfinden, ist die tatsächliche korrelative Charakterisierung, d.h. dass derselbe Probenbereich mit drei Verfahren deckungsgleich abgebildet wird. Darüber werden neue Auswertungen ermöglicht, die in diesem Detailgrad und dieser Systematik bisher nicht möglich waren, um zum jetzigen Zeitpunkt bereits teilautomatisiert und effizient über MATLAB-Auswerteskripte realisiert sind. Die ausführliche Beschreibung der

dafür notwendigen Datenaufbereitung und Registrierung hebt die vorliegende Arbeit von anderen Arbeiten aus der Literatur ab.

Durch den erarbeiteten korrelativen Ansatz können EBSD-Informationen als ideale, komplementäre Informationsquelle zu den Mikroskopaufnahmen in LM und REM ergänzt werden. Die EBSD-Daten beruhen auf der Messung kristallographischer Orientierungen und haben keine subjektive Komponente dadurch, wie das Gefüge unter dem Mikroskop auf das Auge des Experten wirkt. Der korrelative Ansatz ermöglicht neue Untersuchungen und Auswertungen. In Bezug auf eine Gefügeklassifizierung könnte systematisch untersucht werden, welche Klassifizierungsgenauigkeiten mit den unterschiedlichen Methoden (LM, REM, EBSD) erreichbar sind. Darüber wäre eine Bestimmung möglich, welche Methode für welche Fragestellung bzw. welchen Detailgrad der Auswertung und Klassifizierung ausreichend bzw. notwendig ist. Andererseits könnten die EBSD-Daten auch verwendet werden, um bspw. mittels unüberwachtem ML objektivere Klassen für eine Gefügeklassifizierung zu definieren. Dabei könnte auch systematisch untersucht werden, inwiefern sich unterschiedliche Schrittweiten der EBSD-Messung oder unterschiedliche Parameter für das Cleanup der EBSD-Daten auf die Resultate auswirken.

Eine entscheidende Motivation des korrelativen Ansatzes ist das Schaffen von Referenzen, um darüber eine Serienauswertung auf die einfachste Methode (hier: LM) zu reduzieren. So wäre es denkbar, über EBSD automatisch Annotationen für eine Gefügesegmentierung oder -klassifizierung zu erzeugen, die in der Anwendung nur REM- oder sogar nur LM-Bilder verwendet.

Durch eine zukünftige Weiterentwicklung von Datenaufbereitung und Auswerteskript könnte eine objektweise Berechnung der Missorientierungswinkelverteilung ergänzt werden. Aktuell ist diese nicht implementiert, wird durch die Auswertung der Grenzflächenarten allerdings ansatzweise berücksichtigt. Ein Aspekt, der prinzipiell jeden korrelativen Ansatz betrifft, und insbesondere die mit EBSD-Messungen mit einem Proben tilt von 70° im REM, ist eine potenzielle Verzerrung der Mikroskopaufnahmen durch den bUnwarpJ Algorithmus. Dies könnte dementsprechend die bestimmten Objektmorphologien oder Substrukturcharakteristika verändern. Der Effekt sollte tendenziell klein sein, was stichprobenartig bestätigt werden konnte.

Die korrelative Charakterisierung stellt nun eine Grundlage für die Untersuchungen in den folgenden Kapiteln dar: (1) Die fundierte, objektive und reproduzierbare Zuordnung der Grundwahrheit für die Klassifizierung von Bainit-Unterklassen in Zweiphasenstählen. (2) Die fundierten, objektiven und reproduzierbaren Annotationen für die Segmentierung des lattenförmigen Bainits in Multiphasenstählen mittels DL. (3) Die Beurteilung und korrekte

Einschätzung der Unterscheidung von bainitischem und polygonalem Ferrit in Multiphasenstählen anhand von EBSD-Daten. Darauf aufbauend können EBSD-Referenzen zur Unterscheidung von bainitischem und polygonalem Ferrit geschaffen werden, die es wiederum erlauben, die Möglichkeiten und Grenzen einer reinen LM-Auswertung zu bestimmen.

7 Machine Learning Klassifizierung von Bainit in Zweiphasenstählen

Ziel ist die objektweise ML-basierte Klassifizierung der C-reichen Zweitphase-Objekte in einer ferritischen Matrix in Zweiphasenstählen, unter Berücksichtigung bainitischer Unterklassen. Ausgangspunkt ist die dieser Arbeit vorangegangene Promotion von Jessica Gola [187], bei dem die C-reiche Zweitphase in Perlit, Bainit und Martensit klassifiziert wurde. Größte Herausforderung ist die objektive und reproduzierbare Zuordnung der Grundwahrheit der bainitischen Gefüge für diese ML-Klassifizierung, die bislang lediglich als Sammelklasse für sämtliche Gefügebestandteile genutzt wurde, die nicht dem Perlit und nicht dem Martensit zugeordnet werden konnten. Bei der Betrachtung der komplexen bainitischen Strukturen entstehen noch immer immense Uneinigheiten zwischen Experten. Dieser Sachverhalt spiegelte sich auch im durchgeführten Ringversuch wider. Um eine möglichst objektive Grundwahrheit zu erhalten, wurden Referenzproben hergestellt und eine korrelative Charakterisierung inklusive EBSD angewandt. Die letztliche ML-Klassifizierung erfolgte über einen probabilistischen Klassifikator, damit Vertrauens-Metriken für die gesamte Klassifizierung abgeleitet werden können. Die Klassifizierung und nachfolgende Quantifizierung werden an praktischen Anwendungsbeispielen visualisiert.

7.1 Stand der Technik

Eine Segmentierung der Zweiphasenstähle (in dieser Arbeit: ferritische Matrix mit Perlit, Bainit oder Martensit als C-reiche Zweitphase) stellt i.d.R. keine Herausforderung dar. Nach geeigneter Ätzung (z.B. modifizierte Beraha, 4.5) können ferritische Matrix und die C-reiche Zweitphase i.d.R. über eine Schwellwert-Segmentierung und passende Binärbildnachbearbeitung voneinander getrennt werden. Die eigentliche Herausforderung ist die anschließende Klassifizierung der C-reichen Zweitphase und insbesondere bei Berücksichtigung von Bainit-Unterklassen die Zuordnung der Grundwahrheit für eine ML-Klassifizierung.

Eine Machbarkeit der ML-basierten Klassifizierung von Bainit-Unterklassen wurde in Vorarbeiten [206] bereits nachgewiesen. Mit Bildtexturparametern in Kombination mit ML konnten Perlit, Martensit sowie vier Bainit-Unterklassen (granularer, oberer, degenerierter oberer und unterer Bainit gemäß Schema nach Zajac et al. [10]) in speziell hergestellten Referenzproben klassifiziert werden. Zur Klassifizierung von Mikroskop-Aufnahmen, die gleichzeitig mehrere Bainit-Unterklassen enthalten können, sind in der Literatur allerdings praktisch keine Ansätze bekannt. So wurde in den Vorarbeiten zu diesem Promotionsvorhaben sowohl bei Gola

[92,169,205] als auch bei Azimi [168] Bainit lediglich als Sammelklasse (weder Perlit noch Martensit) betrachtet und keine Unterklassen berücksichtigt.

Zum Start des Dissertationsvorhabens wurde ein institutionsübergreifender Ringversuch mit acht Stahl-Experten aus Industrie (Aktien-Gesellschaft der Dillinger Hüttenwerke) und Wissenschaft (Arbeitsgruppe Stahl am Lehrstuhl für Funktionswerkstoffe) initiiert, um den Stand der Beurteilung bainitischer Gefüge zu erfassen und einen gemeinsamen Konsens für die Zuordnung der Grundwahrheit zu schaffen. Da das Ziel eine unvoreingenommene, rein gefügebasierte Klassifizierung ist, wurden keine Informationen zu Chemie oder Prozesses bereitgestellt, sondern lediglich die Gefügebildungen betrachtet. Dafür wurden 50 REM-Aufnahmen von bainitischen Zweitphase-Objekten ausgewählt.

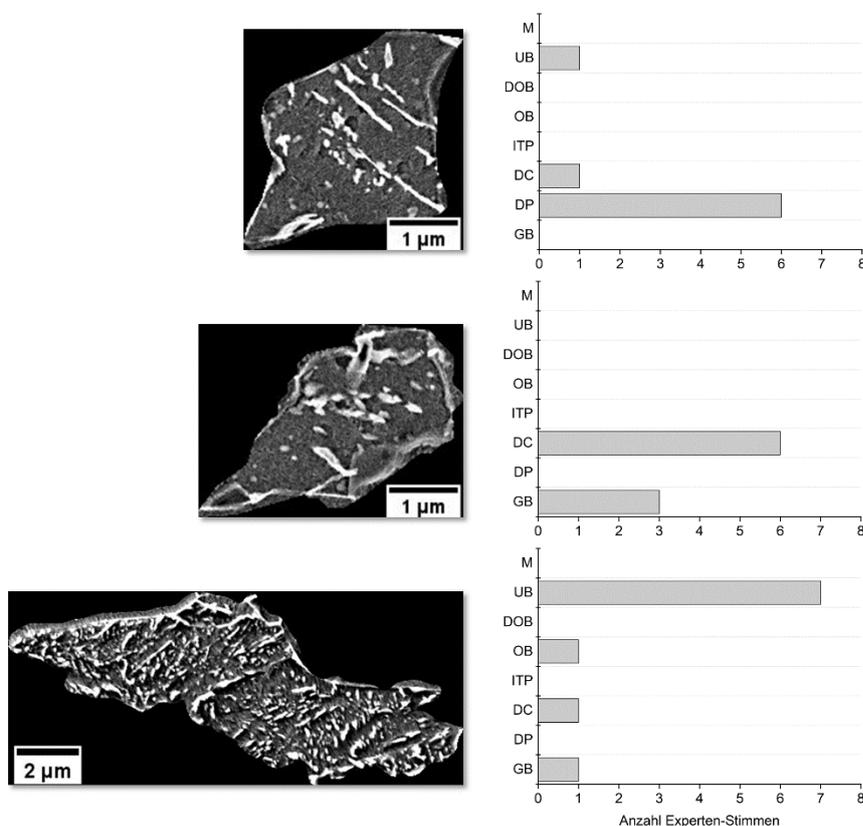


Abbildung 7-1: Auswertung des Ringversuches: Gefügebildungen, bei denen sich die Experten überwiegend einig waren.

Ringversuche können ein einfaches und effizientes Mittel für eine objektivere Zuordnung der Grundwahrheit darstellen (2.4). Gefügebildungen werden an eine Gruppe von Experten übergeben. Jeder Experte beurteilt und klassifiziert die Gefügebildungen. Die finale Klasse wird über einen Mehrheitsentscheid festgelegt, d.h. es wird die Klasse zugeteilt, die von den Experten

am häufigsten benannt wurde. Bei einer Teilmenge der Gefüeaufnahmen konnte dadurch ein Konsens in der Beurteilung und Klassifizierung der bainitischen Gefüge erreicht werden. Abbildung 7-1 zeigt beispielhaft Gefüeaufnahmen, bei denen sich die Experten überwiegend einig waren.

Allerdings gab es auch Gefüeaufnahmen, bei denen die Bewertungen stark auseinander gingen (Abbildung 7-2). Bei einer solchen Uneinigkeit kommen Ringversuche an ihre Grenzen, und andere Methoden zur Zuordnung der Grundwahrheit, die idealerweise nicht mehr nur darauf beruhen, wie das Gefüge auf das Auge des Experten wirkt, müssen gefunden werden. In Frage kommen dafür die Verwendung von gezielt hergestellten Referenzzuständen sowie eine korrelative Charakterisierung mit EBSD als zusätzlicher Informationsquelle.

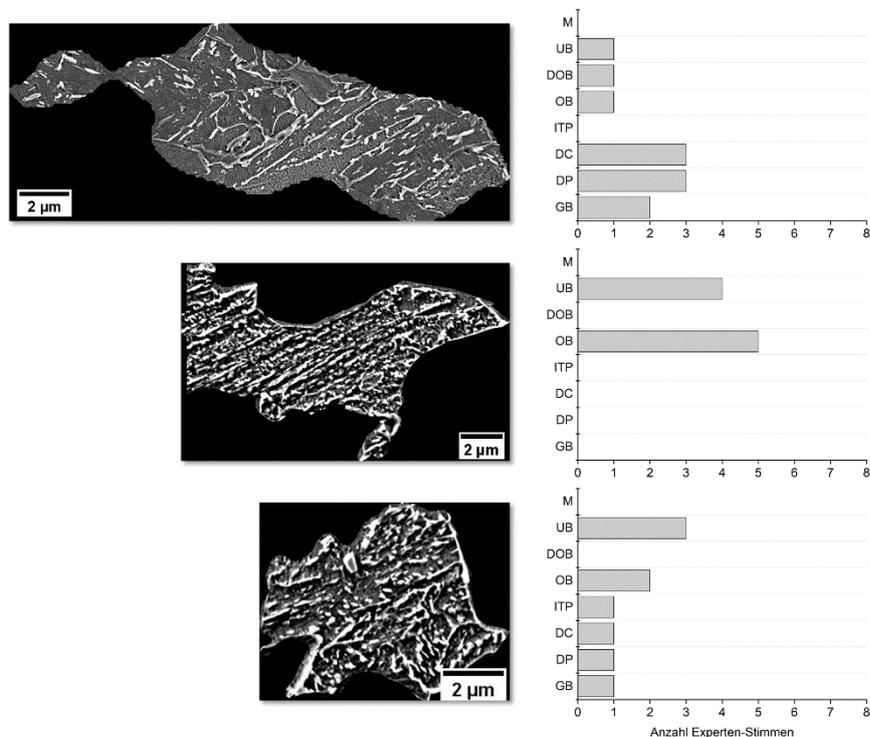


Abbildung 7-2: Auswertung des Ringversuches: Gefüeaufnahmen, bei denen sich die Experten uneinig waren.

Im Folgenden werden der verwendete Datensatz und die extrahierten Gefügemerkmale beschrieben, anschließend wird der Prozess der Grundwahrheit-Zuordnung erörtert. Es folgen Methodik, Ergebnisse und Diskussion der letztlichen ML-Klassifizierung. Der Großteil der Ausführungen zur ML-Klassifizierung der Bainit-Unterklassen wurde bereits im Journal Metals [208] veröffentlicht. Allgemeine Aspekte zur Zuordnung der Grundwahrheit wurden im ASM Journal Advanced Materials & Processes publiziert [200].

7.2 Datensatz und Grundwahrheit

7.2.1 Existierender Datensatz

Aus dem vorherigen Promotionsprojekt von Jessica Gola [187] wurden sowohl Probenmaterial als auch der daraus generierte Datensatz weiterverwendet. Die Erzeugung dieses Datensatzes ist im Anhang zusammengefasst (10.5). Von ausgewählten Proben wurden neue, korrelative Aufnahmen aus LM, REM und EBSD angefertigt. Darüber hinaus wurden mittels Abschreckdilatometer gezielt bainitische Referenzzustände hergestellt (4.3).

Folgende Merkmale der Zweitphase Objekte wurden aus den Gefügaufnahmen erhoben: (1) die Morphologie der Substruktur (46 Merkmale), (2) die Bildtextur der Substruktur in Form von Haralick-Parametern (38 Merkmale) und LBP (56 Merkmale), (3) die Morphologie der Zweitphase-Objekte. Die Objektmorphologie wurde in der Vorarbeit von Gola noch zum Klassifizieren verwendet. Jetzt wird sie nicht mehr verwendet, da sie im Hinblick auf Probenorientierung und Prozessbedingungen, die am wenigsten robuste Parametergruppe ist. Stattdessen wird sie nur noch erhoben und mitgeführt für die spätere Verwendung in Quantifizierung und Korrelationen. LBP wurden in der vorliegenden Arbeit neu zum Datensatz hinzugefügt, da sie in Vorarbeiten ihre Eignung zur Unterscheidung bainitischer Gefüge zeigten [206]. Es wurde ein multiscale LBP aus vier verschiedenen Mappings verwendet. Eine Übersicht aller extrahierten Merkmale findet sich im Anhang (10.6).

Kennzahlen des Datensatzes sind in Tabelle 7-1 zusammengefasst. Die Erweiterung der Klassen um die Bainit-Unterklassen macht eine neue Annotation notwendig. Gleichzeitig werden bei dieser Gelegenheit auch die beiden anderen Klassen erneut verifiziert.

Tabelle 7-1: Kennzahlen des Datensatzes des vorherigen Promotionsvorhabens [187].

Proben	Aufnahmen	Zweitphase Objekte			
		Gesamt	Perlit	Bainit	Martensit
14	64	11332	1279	5973	4080

7.2.2 Zuordnung der Grundwahrheit

In den Vorarbeiten zur Klassifizierung der vorliegenden Zweiphasenstähle war die Zuordnung der Grundwahrheit noch zweifelsfrei rein über das visuelle Erscheinungsbild der Gefüge im REM möglich. Da alle Gefüge, die weder Perlit noch Martensit sind, als Bainit gelabelt wurden, noch keine Bainit-Unterklassen berücksichtigt wurden und die Zuordnung der Grundwahrheit pro Probe erfolgte, d.h. alle Objekte einer Probe wurden einer Klasse zugeordnet, war der Prozess der

Zuordnung auch vergleichsweise einfach und effizient. Die objektive und reproduzierbare Einteilung der Bainit-Unterklassen stellt für diese Aufgabe nun die größte Herausforderung dar.

7.2.2.1 Referenzproben

Nach der Probenherstellung (siehe 4.3) wurden die Proben längs getrennt, leitfähig eingebettet und wie in 4.4 präpariert. Die Kontrastierung erfolgte mittels modifizierter Beraha Ätzung. Es wurden sowohl REM-Aufnahmen als auch korrelative Aufnahmen aus LM, REM und EBSD (siehe 4.6) erzeugt³. Die isotherme Umwandlung bei 525 °C resultierte in nahezu vollständigem oberem Bainit, während die Umwandlung bei 425 °C nahezu vollständig unteren Bainit produzierte. Dies zeigt sich sowohl in den typischen Karbid-Morphologien in den REM-Aufnahmen (Abbildung 4-4) als auch in der Missorientierungsverteilung der EBSD-Messung (Abbildung 7-3).

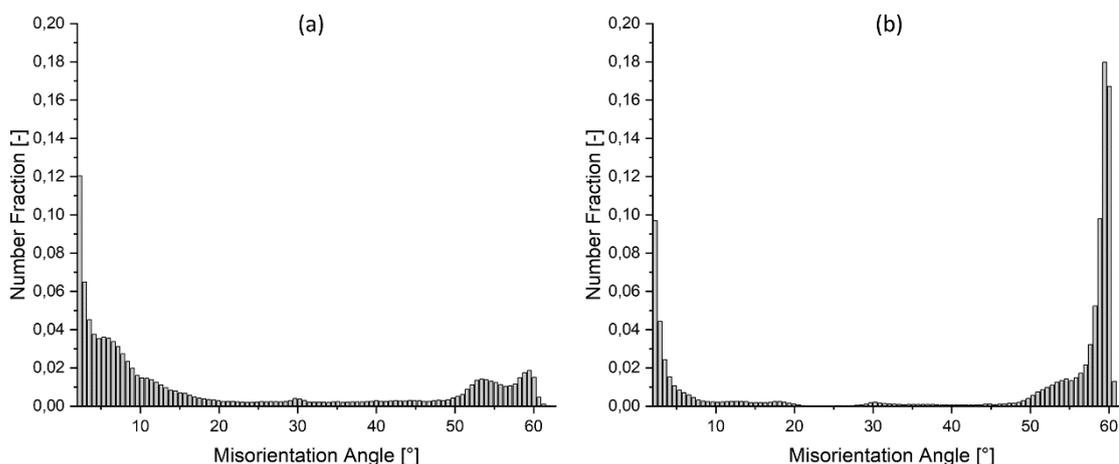


Abbildung 7-3: Missorientierungswinkelverteilungen der EBSD-Messung der isotherm umgewandelten Proben. (a): Umwandlung bei 525 °C: Hoher Anteil an Missorientierungen < 20 ° und geringer Anteil an Missorientierungen > 50 °, was dem typischen Erscheinungsbild von oberem Bainit entspricht (siehe 2.1.1). (b) Umwandlung bei 425 °C: Geringer Anteil an Missorientierungen < 20 ° und hoher Anteil an Missorientierungen > 50 °, was dem typischen Erscheinungsbild von unterem Bainit entspricht (siehe 2.1.1).

Abbildung 7-4 zeigt REM-Aufnahmen sowie Überlagerungen von REM mit verschiedenen EBSD-Karten des oberen Bainits (Details vergrößert in Abbildung 7-5). Die jeweiligen Körner sind durch Großwinkelkorngrenzen (GWKG, blau, > 15 °) getrennt. Es treten überwiegend Kleinwinkelkorngrenzen (KWKG, grün, 5-15 °) und Sub-Korngrenzen (Sub-KG, rot, 2-5 °) auf. Der geringere GWKG-Anteil und der größere KWKG- und Sub-KG-Anteil äußern sich dementsprechend auch in der Missorientierungswinkelverteilung (Abbildung 7-3a). Die

³ REM-Aufnahmen: Zeiss Merlin, SE2-Detektor, 1000-fache Vergrößerung, Auflösung von 4096 x 3072 px mit einer Pixelgröße von 27,8 nm.

Lattengrenzen des bainitischen Ferrits sind im REM nicht immer gut zu erkennen. Darüber hinaus gibt es Karbidausscheidungen, die aufgrund ihrer Morphologie (Bruchstücke gleichmäßiger Orientierung, gelber Kreis in Abbildung 7-5 D2) stark dem unteren Bainit ähneln, dennoch Bestandteil des oberen Bainits sind.

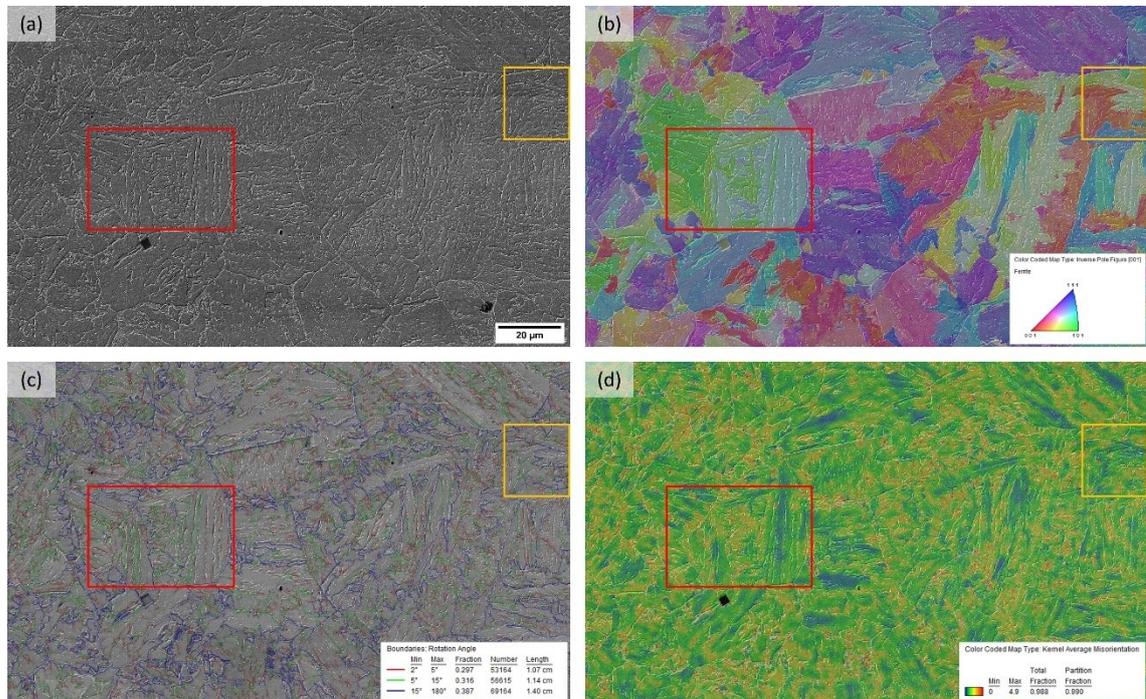


Abbildung 7-4: Korrelative Aufnahmen REM + EBSD, nach Registrierung, der bei 525 °C isotherm umgewandelten Probe. (a) REM. (b) REM überlagert mit EBSD IPF-Karte. (c) REM überlagert mit EBSD Grenzflächen-Karte. (d) REM überlagert mit EBSD KAM-Karte. Detailausschnitte vergrößert in Abbildung 7-5.

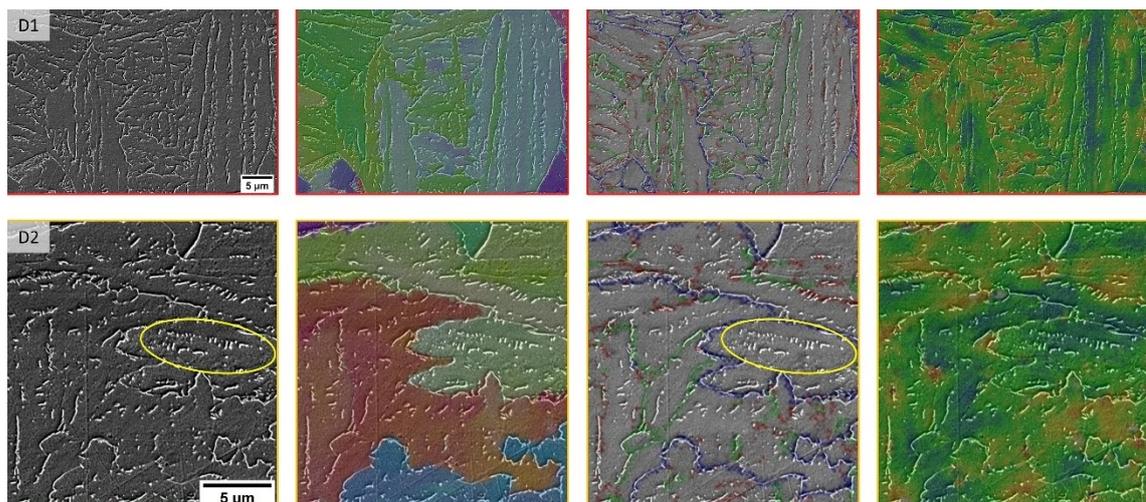


Abbildung 7-5: (D1) Detailausschnitt 1 aus Abbildung 7-4 (a)-(d). (D2) Detailausschnitt 2 aus Abbildung 7-4 (a)-(d).

Abbildung 7-6 zeigt REM-Aufnahmen sowie Überlagerungen von REM mit verschiedenen EBSD-Karten des unteren Bainits (Details vergrößert in Abbildung 7-7). Die Lattenstruktur ist deutlich feiner verglichen mit dem oberen Bainit, und die Latten sind größtenteils durch GWKKG getrennt. Dies zeigt sich auch in der Missorientierungswinkelverteilung (Abbildung 7-3b). Die Karbidausscheidungen entsprechen überwiegend dem klassischen Erscheinungsbild des unteren Bainits, also einem hohen Anteil an Missorientierungen $> 50^\circ$ (siehe 2.1.1). Allerdings gibt es auch Bereiche, in denen aufgrund der nicht gut erkennbaren Lattenstruktur eine Unterscheidung zwischen oberem und unterem Bainit schwierig bleibt.

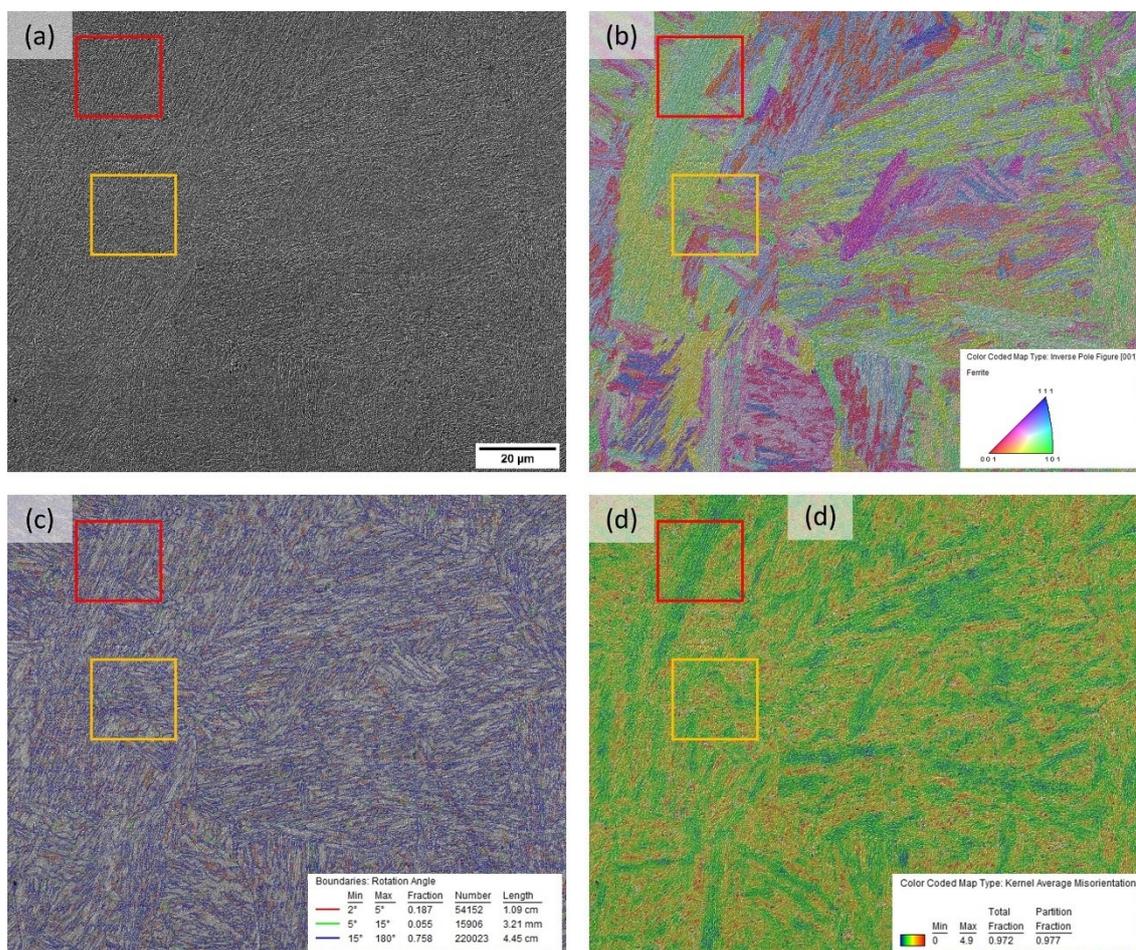


Abbildung 7-6: Korrelative Aufnahmen REM + EBSD, nach Registrierung, der bei 425 °C isotherm umgewandelten Probe. (a) REM. (b) REM überlagert mit EBSD IPF-Karte. (c) REM überlagert mit EBSD Grenzflächen-Karte. (d) REM überlagert mit EBSD KAM-Karte. Detailausschnitte vergrößert in Abbildung 7-7.

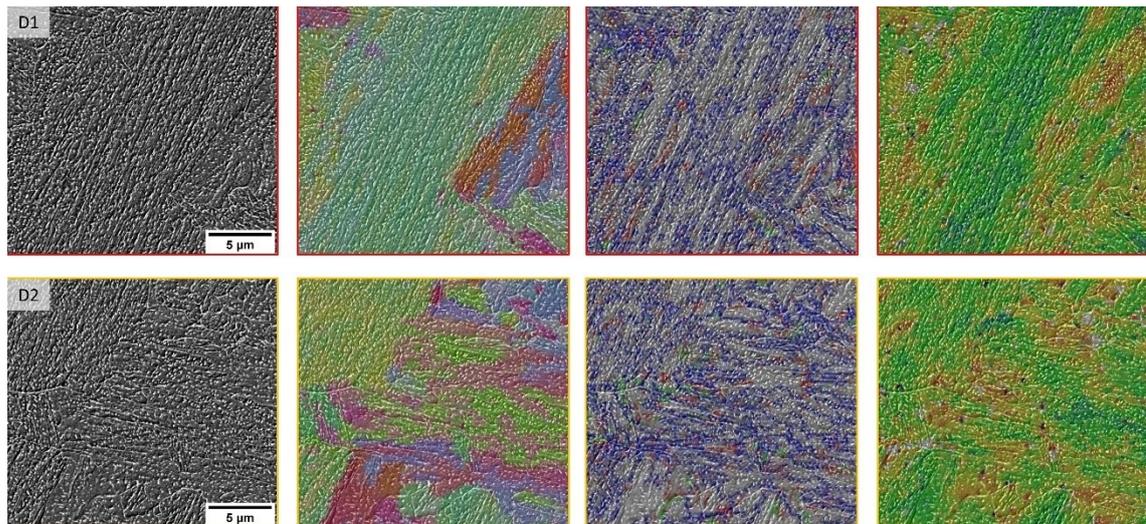


Abbildung 7-7: (D1) Detailausschnitt 1 aus Abbildung 7-6 (a)-(d). (D2) Detailausschnitt 2 aus Abbildung 7-6 (a)-(d).

Zur Unterscheidung von oberem und unterem Bainit eignen sich in erster Linie EBSD Darstellungen der Körner und Korngrenzen. Insbesondere die Art und Dichte der Grenzflächen ist geeignet, die auch in gewisser Weise die Missorientierungswinkelverteilung wiedergibt. Eine Unterscheidung über Missorientierungsparameter wie KAM erscheint dagegen schwieriger, u.a. auch weil oberer und unterer Bainit nicht in derselben Aufnahme vorliegen, aber auch, weil KAM nur im Kleinwinkelbereich arbeitet und nicht über Korngrenzen hinweg, sodass GWKG nicht eingehen. Es traten Bereiche auf, bei denen die Zuordnung zu oberem oder unterem Bainit rein anhand des Erscheinungsbilds im REM kaum möglich ist, und stattdessen die EBSD-Informationen benötigt werden. Teilweise wurden auch Bereiche gefunden, bei denen trotz EBSD-Informationen bei einer qualitativen Betrachtung die Trennung schwierig bleibt.

Zusätzlich zu diesem qualitativen Übertragen der Erkenntnisse der Referenzproben wäre auch eine quantitative Auswertung vorstellbar, z.B. indem aus den Referenzproben repräsentative EBSD-Merkmale oder Morphologien und Bild-Texturen von oberem und unterem Bainit extrahiert werden, um darüber ein Modell zum Labeln zu trainieren. Ein solches Vorgehen kann der sog. Bildähnlichkeitssuche zugeordnet werden. Für die vorliegende Fragestellung ist dies allerdings nur begrenzt möglich, bzw. mit einer gewissen Unsicherheit verbunden, da die Referenzproben vollumgewandelte Gefüge aufweisen, der Datensatz jedoch aus Zweiphasen-Objekten aus Zweiphasenstählen besteht, und darüber hinaus die Referenzen erst nachträglich dem existierenden Datensatz hinzugefügt wurden.

7.2.2.2 Korrelative Charakterisierung

Als Unterstützung für die Zuordnung der Grundwahrheit und zur Erzeugung von EBSD-Referenzen wurden Proben des existierenden Datensatzes (Zweiphasenstähle aus industrieller Produktion) erneut, und zwar korrelativ mittels LM, REM und EBSD, untersucht. Proben wurden aus dem existierenden Datensatz so ausgewählt, dass die komplette Bandbreite an Gefügen sowie die größte Vielfalt und Komplexität an bainitischen Strukturen abgedeckt wird (Tabelle 7-2).

Tabelle 7-2: Für die korrelative Charakterisierung verwendete Proben (Zweiphasenstähle aus industrieller Produktion) und deren Gefügebestandteile.

Probe	Gefügebestandteile (C-reiche Zweitphase)
M836	Perlit, degenerierter Perlit
1077	Degenerierter Perlit, Zementit-Bruchstücke, Produkte unvollständiger Umwandlung
C858	Degenerierter Perlit, Zementit-Bruchstücke, Produkte unvollständiger Umwandlung, Martensit
Z518B	Zementit-Bruchstücke, Produkte unvollständiger Umwandlung, oberer Bainit, unterer Bainit
1450	Oberer Bainit, unterer Bainit, Martensit
1318	Martensit

Der experimentelle Ablauf entspricht der in 4.6 und 6.1 definierten Vorgehensweise. Alle Proben wurden mittels modifizierter Beraha geätzt. Da die Proben M836, 1077 und C858 aufgrund der perlitischen bzw. überwiegend groben bainitischen Strukturen einen geringen Kontrast der Zweitphase in der EBSD IQ aufweisen, ist eine automatische Registrierung mittels SIFT und bUnwarpJ nicht möglich (siehe 6.1). Um den für diese Proben für die automatische Registrierung notwendigen Korngrenzenkontrast zu erhalten, werden diese Proben im Anschluss zusätzlich mit 2%-iger alkoholischer Nital geätzt. Die Kompatibilität von modifizierter Beraha und Nital als zweistufige Ätzung ist durch Vorarbeiten bekannt. Die Nital LM-Aufnahmen dienen lediglich der Registrierung. Zur Gefügebeurteilung werden die REM-Aufnahmen⁴ nach mod. Beraha benutzt. Da das Ziel der korrelativen Charakterisierung eine unterstützende Information zum existierenden Datensatz, aber nicht die Generierung eines neuen Datensatzes ist, wurde lediglich eine qualitative Auswertung, wie in 6.2 beschrieben, durchgeführt. Dies beinhaltet das Erstellen von Überlagerungen der REM-Aufnahmen mit geeigneten EBSD-Karten, die bei der Beurteilung der bainitischen Strukturen helfen. Die Ergebnisse in Form der qualitativen Auswertung erlauben ein

⁴ REM-Aufnahmen: Zeiss Merlin, SE2-Detektor, 1000-fache Vergrößerung, Auflösung von 4096 x 3072 px mit einer Pixelgröße von 27,8 nm.

besseres Verständnis der bainitischen Gefüge, das für die Zuordnung der Grundwahrheit auf den existierenden Datensatz übertragbar ist.

Die nachfolgenden Abbildungen zeigen Überlagerungen der REM-Aufnahmen verschiedener Zweitphase-Objekte mit unterschiedlichen EBSD-Karten. Perlitische Zweitphase-Objekte (Abbildung 7-8) sind i.d.R. auch ohne EBSD durch die regelmäßige Zementitlamellen-Anordnung klar zu erkennen. In den Darstellungen der Unique Grain Color (UGC)-Karte oder der IPF-Karte ist zu erkennen, ob eine große Perlitkolonie aus einzelnen „Perlit-Körnern“ besteht. Ist dies der Fall, treten in den Objekten auch GWKG auf. KWKG oder Sub-KG treten allerdings kaum auf. Teilweise können die perlitischen Bereiche kristallographisch betrachtet zu angrenzenden polygonalen Ferritkörnern gehören. IQ und CI sind im Vergleich zu anderen Zweitphase-Klassen wie Bainit und Martensit eher höher. Missorientierungen erscheinen etwas niedriger als bei anderen Klassen.

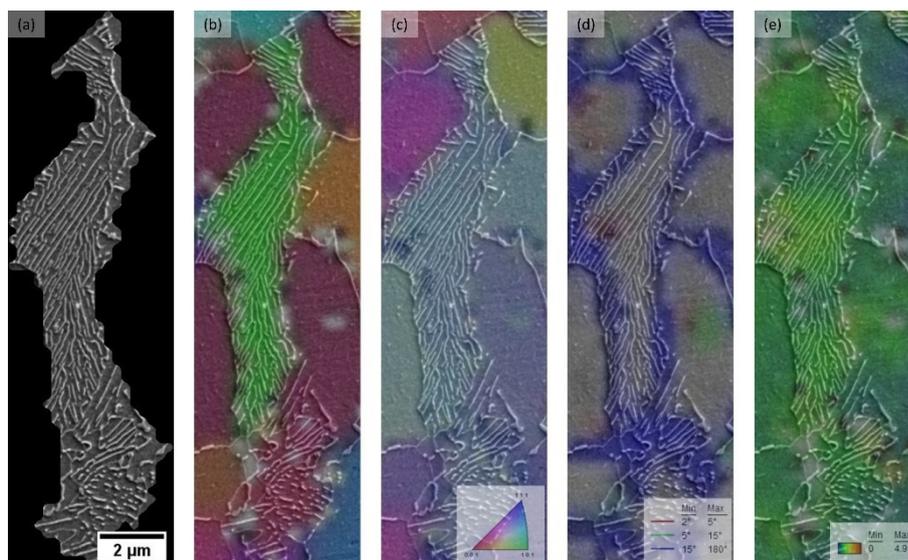


Abbildung 7-8: Zweitphase Objekt der Klasse Perlit. REM (a) und Überlagerungen aus REM mit Unique Grain Color (UGC)-Karte (b), Inverse Pol Figure (IPF)-Karte (c), Grenzflächen-Karte (d) und KAM-Karte (e).

Degenerierter Perlit (Abbildung 7-9) hat in den EBSD-Messungen praktisch dasselbe Erscheinungsbild wie Perlit. Die oben genannten Betrachtungen zu Korngrenzenarten, IQ und CI gelten analog. Tendenziell sind die Objekte kleiner, und kristallographisch betrachtet sind sie öfter einem benachbarten polygonalen Ferritkorn zugehörig, sichtbar in der UGC-Karte oder der IPF-Karte. Missorientierungen erscheinen tendenziell niedriger als bei anderen Klassen.

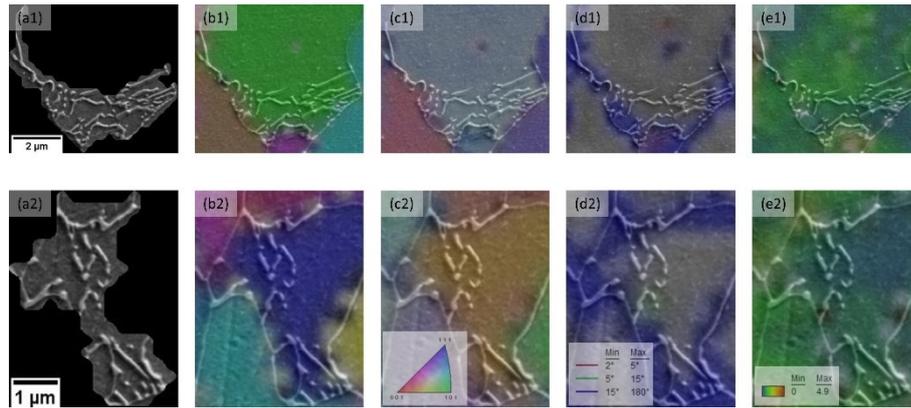


Abbildung 7-9: Zweitphase Objekte der Klasse degenerierter Perlit. REM (a1,2) und Überlagerungen aus REM mit UGC-Karte (b1,2), IPF- Karte (c1,2), Grenzflächen-Karte (d1,2) und KAM-Karte (e1,2).

Die EBSD-Charakteristika der Klasse Zementit-Bruchstücke (Abbildung 7-10, Abbildung 7-11) sind schwierig zu verallgemeinern, da sie viele Erscheinungsformen zeigt und sowohl sehr kleine als auch große Objekte dieser Klasse angehören. Kleine Objekte liegen überwiegend nicht als eigene Körner vor, sondern sind Bestandteil der umliegenden polygonalen Ferritkörnern, ähnlich zu den Objekten der Klasse degenerierter Perlit. In diesem Fall treten auch wenige Großwinkel-KG auf. Bei größeren Objekten sind die einzelnen DC-Bereiche oft ebenfalls den umliegenden polygonalen Ferritkörnern zugehörig. Dort können jedoch mehr Großwinkel-KG als auch einige Kleinwinkel- und Sub-KG auftreten. Missorientierungen können tendenziell höher sein als in den Klassen Perlit und degenerierter Perlit.

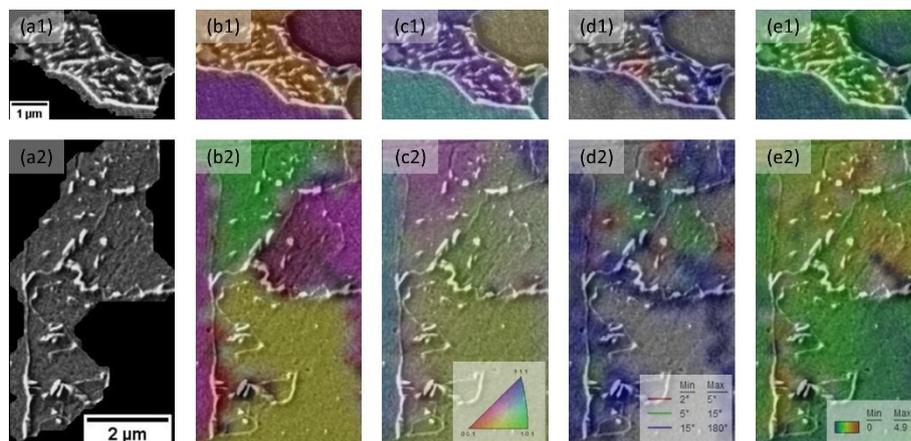


Abbildung 7-10: Kleine Zweitphase Objekte der Klasse Zementit-Bruchstücke. REM (a1,2) und Überlagerungen aus REM mit UGC-Karte (b1,2), IPF-Karte (c1,2), Grenzflächen-Karte (d1,2) und KAM-Karte (e1,2).

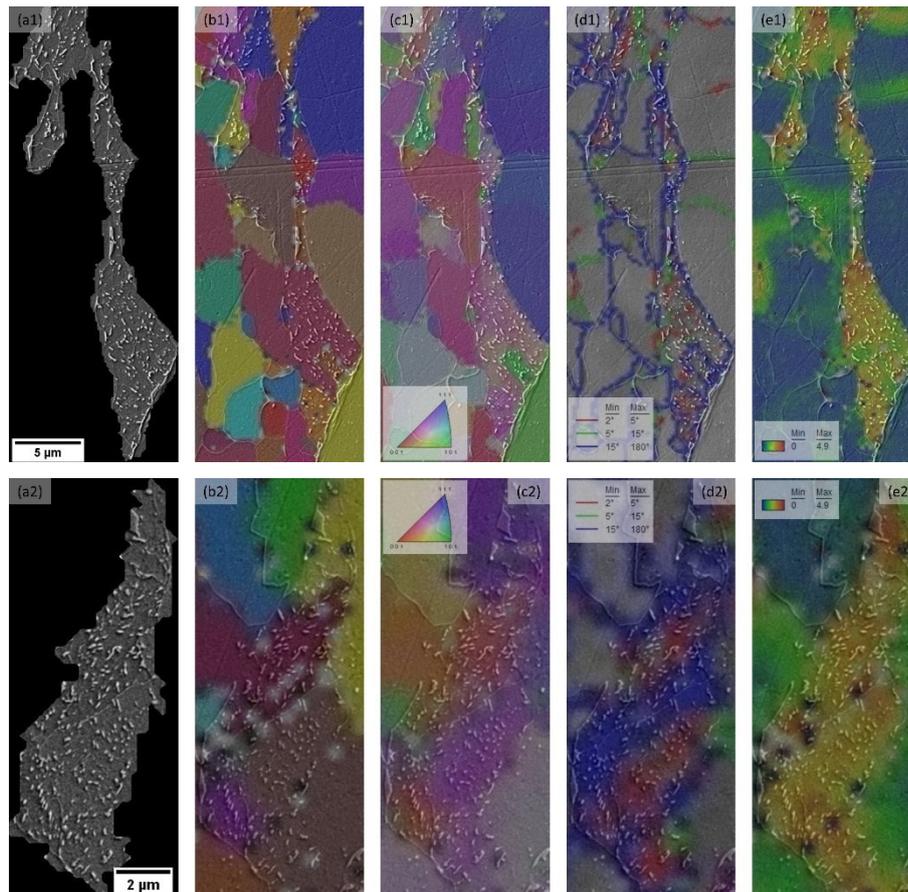


Abbildung 7-11: Größere Zweitphase Objekte der Klasse Zementit-Bruchstücke. REM (a1,2) und Überlagerungen aus REM mit UGC-Karte (b1,2), IPF-Karte (c1,2), Grenzflächen-Karte (d1,2) und KAM-Karte (e1,2).

In Objekten der Klasse ITP (Abbildung 7-12) treten in den M/A Bereichen teilweise sehr niedrige IQ- und CI-Werte auf. Außerdem sind dort überwiegend GWKG präsent. Da die weiteren Bestandteile eines ITP-Objektes, die kein M/A sind, in verschiedenen Ausprägungen vorliegen können, es ist schwierig, deren EBSD-Charakteristika pauschal zusammenzufassen. Haben diese Bestandteile ein ähnliches Erscheinungsbild wie die Klassen DP oder DC, treffen auch weitestgehend die obigen Beschreibungen dieser Klassen zu. Eine Erkennung der austenitischen Bereiche der M/As über die EBSD Phasen-Karte, die ferritische und austenitische Phasen identifiziert, ist nur begrenzt möglich, da diese Bereiche sehr klein sind, und bei der vergleichsweise groben Schrittweite der EBSD Messung ($0,35 \mu\text{m}$), die zum Auswerten eines repräsentativen Gefügebereichs benötigt wird, nur bedingt erfasst werden (Abbildung 7-13). Außerdem kann die Indizierung von Austenit auch auf schlechte EBSD-Pattern der Ferritphase anspringen.

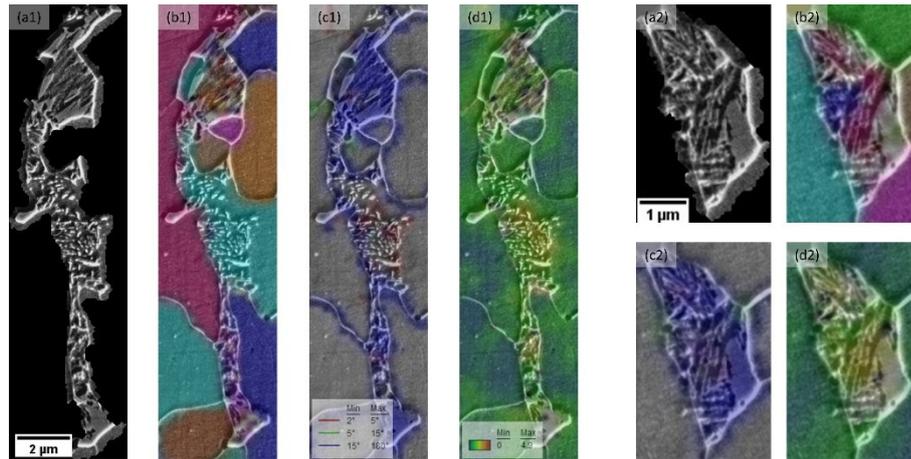


Abbildung 7-12: Zweitphase Objekt der Klasse ITP. REM (a1,2) und Überlagerungen aus REM mit UGC-Karte (b1,2), Grenzflächen-Karte (c1,2) und KAM-Karte (d1,2).

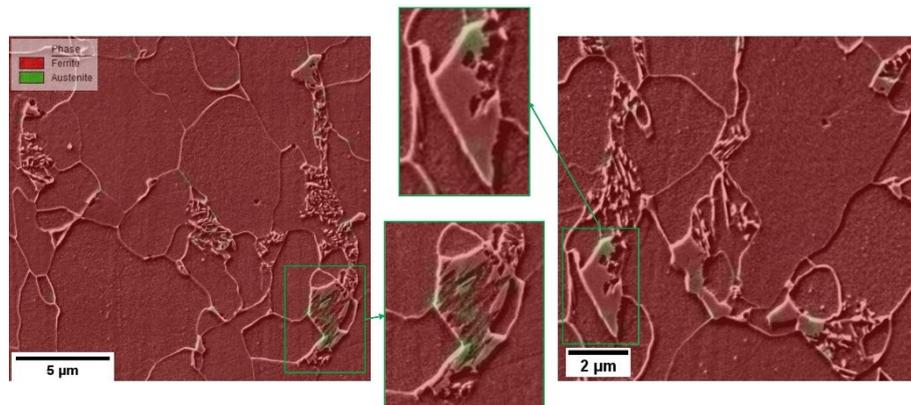


Abbildung 7-13: Überlagerungen aus REM mit EBSD-Phasen-Karte. Ferritische Bereiche sind rot, austenitische Bereiche grün gekennzeichnet. Aufgrund der Schrittweite von $0,35 \mu\text{m}$ bei der EBSD-Messung werden die austenitischen Bereiche nur begrenzt erkannt.

Größere Martensit Objekte (Abbildung 7-14) zeigen viele kleine „Körner“ im Sinne der Martensitnadeln, sichtbar in UGC-Karte und IPF-Karte. Dementsprechend ist die Dichte an Großwinkel-KG hoch. Kleinere Martensit Objekte (Abbildung 7-15) können teilweise größere fehlindizierte Bereiche aufweisen. Die Missorientierungen sind tendenziell hoch und können zum Teil auch in die umgebende polygonale Ferritmatrix hineinstrahlen. IQ- und CI-Werte sind niedrig. Bainitische oder (selbst-)angelassene Bereiche in einem Martensitobjekt können durch die geringere Dichte an Großwinkel-KG und einheitlicheren IPF-Bereichen erkannt werden.

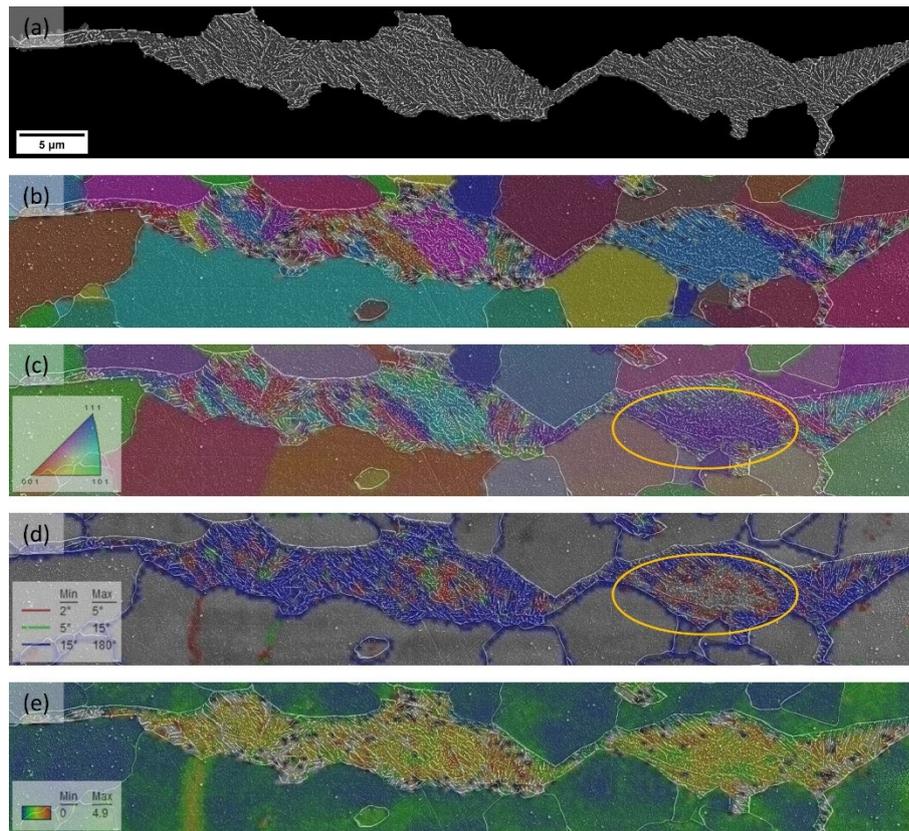


Abbildung 7-14: Größere Zweitphase Objekt der Klasse Martensit. REM (a) und Überlagerungen aus REM UGC-Karte (b), IPF-Karte (c), Grenzflächen-Karte (d) und KAM-Karte (e).

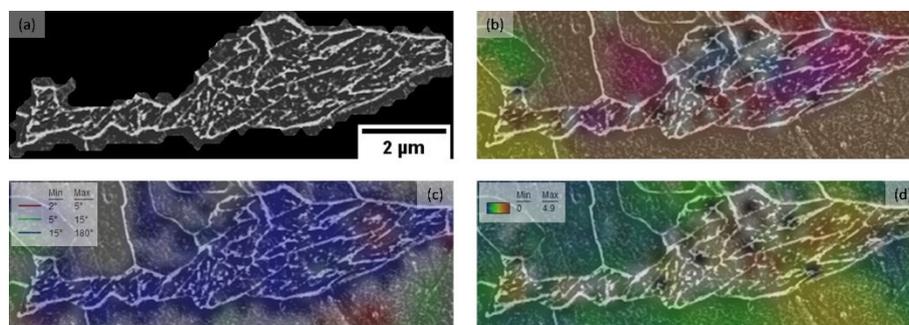


Abbildung 7-15: Kleinere Zweitphase Objekt der Klasse Martensit. REM (a) und Überlagerungen aus REM mit UGC-Karte (b), Grenzflächen-Karte (c) und KAM-Karte (d).

Objekte des oberen Bainits (Abbildung 7-16) zeigen im Vergleich zu anderen Klassen (Martensit, unterer Bainit) große „Körner“, erkennbar in UGC-Karte und IPF-Karte. Die jeweiligen Körner sind durch GWKG (blau, $> 15^\circ$) getrennt. Innerhalb der Körner treten überwiegend KWKG (grün, $5-15^\circ$) und Sub-Korngrenzen (Sub-KG, rot, $2-5^\circ$) auf. Dies stimmt mit den Ergebnissen der Untersuchung der Referenzproben überein.

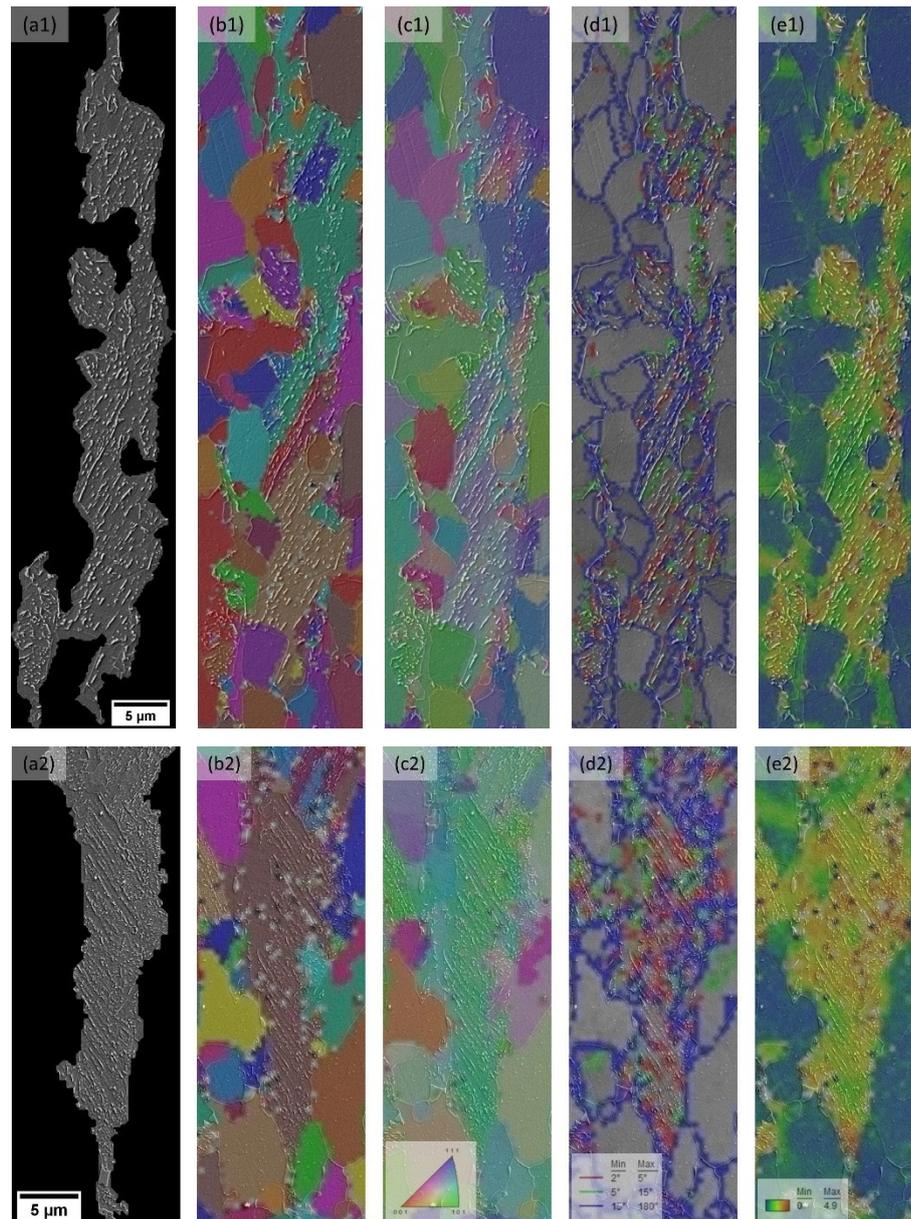


Abbildung 7-16: Zweitphase Objekt der Klasse oberer Bainit. REM (a) und Überlagerungen aus REM mit UGC-Karte (b), IPF-Karte (c), Grenzflächen-Karte (d) und KAM-Karte (e).

Die Lattenstruktur in den Objekten des unteren Bainits (Abbildung 7-17), hinsichtlich UGC-Karte und IPF-Karte ist deutlich feiner, und die Latten sind überwiegend durch Großwinkel-KG getrennt. Auch dies deckt sich mit der Untersuchung der Referenzproben. Der Unterschied in den EBSD-Merkmalen zwischen oberem und unterem Bainit wird bei Zweitphase-Objekten, die Strukturen beider Klassen enthalten, deutlich (Abbildung 7-18).

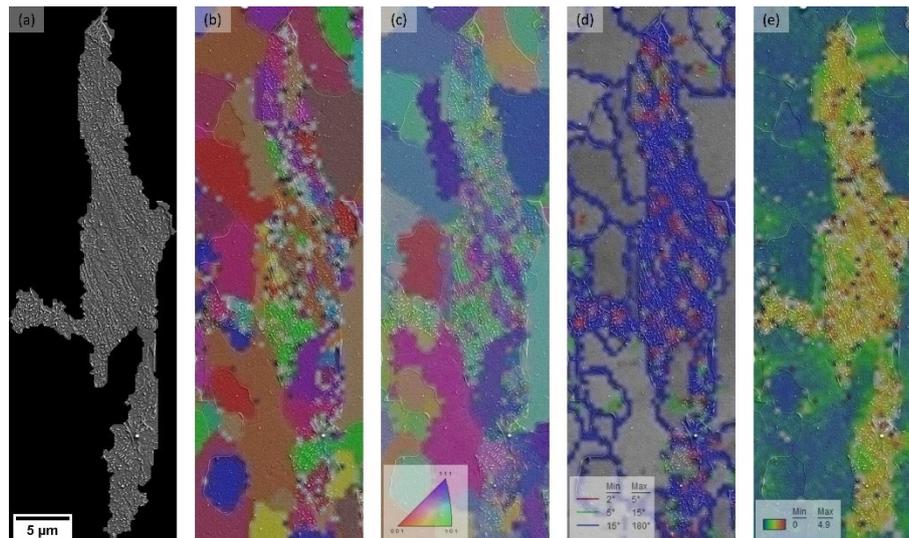


Abbildung 7-17: Zweitphase Objekt der Klasse unterer Bainit. REM (a) und Überlagerungen aus REM mit UGC-Karte (b), IPF-Karte (c), Grenzflächen-Karte (d) und KAM-Karte (e).

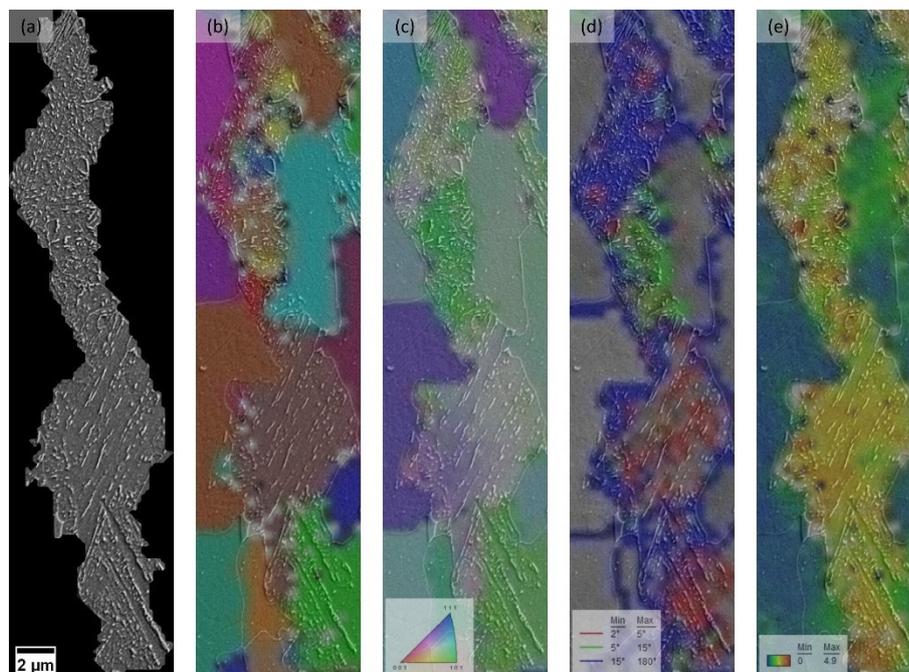


Abbildung 7-18: Zweitphase Objekt mit Bereichen von oberem und unterem Bainit. REM (a) und Überlagerungen aus REM mit UGC-Karte (b), IPF-Karte (c), Grenzflächen-Karte (d) und KAM-Karte (e).

Insgesamt erscheinen die Darstellungen von Körnern und Grenzflächenarten sehr gut zur Unterscheidung der verschiedenen Klassen geeignet. Je kleiner die Zweitphase Objekte sind, desto schwieriger fällt die Beurteilung der EBSD-Charakteristika. Allein über EBSD wäre keine

finale Beurteilung möglich⁵. Dies wird nur durch den korrelativen Ansatz in Kombination mit REM möglich. EBSD zeigt sich dabei als ideale komplementäre Informationsquelle zum visuellen Erscheinungsbild der Gefüge, inklusive hochaufgelöster Substruktur, aus den REM-Aufnahmen. Da es sich um gleiche Proben und Gefüge wie im existierenden Datensatz handelt, sind die gewonnenen Erkenntnisse auf den Labelprozess des existierenden Datensatzes übertragbar.

7.2.2.3 Fertig annotierter Datensatz

Die finale Zuordnung der Grundwahrheit erfolgt mit Hilfe der Klassifizierungsschemata aus der Literatur, des Ringversuchs sowie der Übertragung der Erkenntnisse der Referenzproben und der Erkenntnisse der korrelativen Charakterisierung. Weiterhin ist anzumerken, dass keine Sammelklasse für nicht gelabelte Objekte definiert wurde, d.h. alle Zweitphase Objekte wurden direkt einer Klasse zugeordnet. Objekte mit Strukturen mehrerer Klassen wurden nicht gelabelt. Nach dem Annotieren waren die beiden Klassen oberer und unterer Bainit stark unterrepräsentiert (Tabelle 7-3), da es im Datensatz lediglich wenige Objekte mit klaren Strukturen von oberem oder unterem Bainit gibt. Allerdings wurden viele Objekte gefunden, die Strukturen beider Klassen enthalten, deswegen aber nicht gelabelt wurden. Sind bestimmte Klassen in einem Datensatz zu stark unterrepräsentiert, besteht die Gefahr, dass sie vom ML-Algorithmus unzuverlässig erkannt werden. Daher wurden manuell klare OB- und UB-Bereiche aus den größeren Objekten herausgeschnitten.

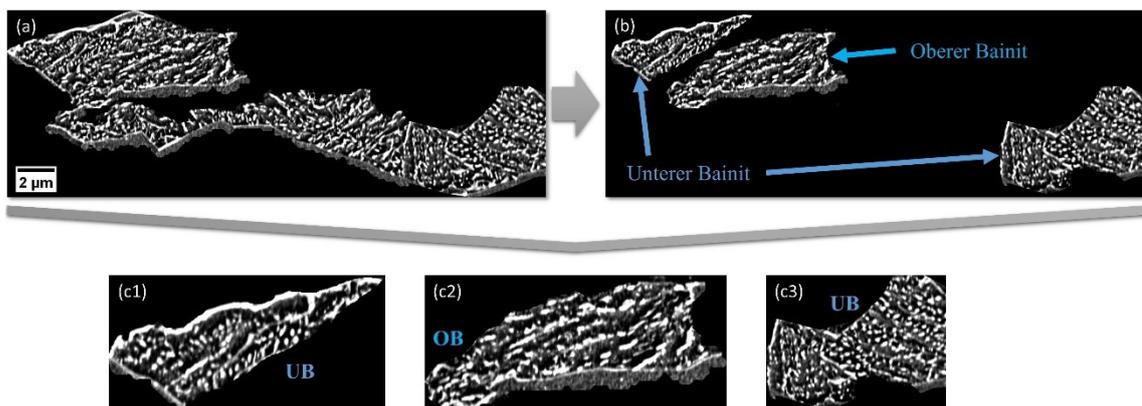


Abbildung 7-19: (a) größeres Zweitphase-Objekt, das Strukturen von OB und UB aufweist. (b) aus diesem Objekt manuell zugeschnittene klare OB- und UB-Strukturen. (c) separate OB- und UB-Objekte, aus denen Gefügemerkmale extrahiert und dem existierenden Datensatz hinzugefügt werden.

⁵ Die Eignung der vergleichsweise groben Schrittweite der EBSD-Messung (0,35 μm), die zum Auswerten eines repräsentativen Gefügebereichs benötigt wird, für die teilweise sehr feinen Gefügestrukturen wird in Kapitel 7.6 nochmals aufgegriffen.

Aus diesen Ausschnitten wurden wiederum Gefügemerkmale extrahiert (siehe 7.2.1 und 10.5) und dem existierenden Datensatz hinzugefügt, um die Datenmenge dieser Klassen für den Trainingsprozess zu erhöhen, siehe Abbildung 7-19.

Der finale annotierte Datensatz, inklusive der Anzahl hinzugefügter manueller Ausschnitte, ist in Tabelle 7-3 gezeigt.

Tabelle 7-3: Klassenverteilung im fertig annotierten Datensatz.

Klasse	Perlit	Degenerierter Perlit	Zementit-Bruchstücke	Produkte unvollständiger Umwandlung	Oberer Bainit	Unterer Bainit	Martensit	Gesamt
Vor Hinzufügen manueller Ausschnitte								
Anzahl Objekte	772	321	964	856	79	87	550	3629
Nach Hinzufügen manueller Ausschnitte								
Anzahl Objekte	772	321	964	856	212	228	550	3903

Auch nachdem durch manuelle Ausschnitte mehr oberer und unterer Bainit Objekte hinzugefügt wurden, ist der Datensatz noch immer unausgewogen. Die Verwendung unausgewogener Klassen zur Erstellung eines ML-Modells kann jedoch zu einer Verzerrung zugunsten von Klassen mit mehr Daten führen [218]. Strategien dagegen werden im folgenden Abschnitt „Datenvorverarbeitung“ diskutiert.

7.3 ML-basierte Klassifizierung

7.3.1 Datenvorverarbeitung

Zunächst werden korrelierende Merkmale entfernt. Da z.B. alle zur Verfügung stehenden morphologischen Parameter erhoben wurden und dort sehr ähnliche oder direkt abhängige Parameter vorliegen (Fläche – Durchmesser, maximaler Ferettdurchmesser – Ellipsen-Hauptachsenlänge) sind starke Korrelationen zu erwarten und ein Entfernen dieser korrelierenden Parameter unabdingbar. Dazu wird der lineare Zusammenhang der Parameter über das Bestimmtheitsmaß (pearson coefficient, R^2) ermittelt. Korrelierende Merkmale mit $R^2 > 0,90$ werden entfernt. Darüber kann die Anzahl der Merkmale signifikant reduziert werden, von 148 auf 72 (19 Haralick Texturparameter, 32 LBP-Parameter, 21 Substrukturmorphologieparameter). Die weiter berücksichtigten Parameter sind im Anhang (10.6) aufgelistet.

Zur Bewertung der Generalisierung des trainierten ML-Modells und des direkten Vergleichs verschiedener Klassifizierungsmodelle mit denselben Daten wurden die Daten zufällig in einen

Trainingssatz (80 %) und einen Testsatz (20 %) aufgeteilt. Bei der Aufteilung der Daten wurde die Klassenverteilung im Trainings- und Testsatz beibehalten.

Bei der Klassifizierung von Bildern wird häufig Data Augmentation zum Ausgleichen der Klassen verwendet. Für die vorliegende Aufgabenstellung können die typischen Data Augmentation Techniken zur Erhöhung der Anzahl der Bilder oder Daten jedoch nicht angewendet werden, da die extrahierten Merkmale bzw. der Merkmalsextraktionsprozess entweder invariant gegenüber diesen Techniken sind (z. B. Drehen, Spiegeln) oder die Gefügemerkmale verfälscht würden (z. B. Zuschneiden, Skalieren, Verzerren). Dennoch gibt es verschiedene Strategien, um unausgewogenen Daten zu begegnen [219]. Diese werden nur im Trainingssatz angewendet.

Zunächst können verschiedene Fehlklassifikationskosten für die jeweiligen Klassen eingeführt werden. Üblicherweise werden allen Klassen dieselben Strafen für eine Fehlklassifizierung zugeordnet, was für reale oder unausgewogene Daten ungeeignet sein kann. Sollen z.B. Patienten als gesund oder krank eingestuft werden, können die Kosten für die falsche Einstufung einer kranken Person als gesund als fünfmal so hoch angesetzt werden wie die Kosten für die falsche Einstufung einer gesunden Person als krank. Dementsprechend können den unterrepräsentierten Klassen erhöhte Strafen zugeordnet werden, um vom ML-Algorithmus eher erkannt zu werden. Vorversuche mit dem vorliegenden Datensatz stellten keine signifikante Verbesserung der Klassifizierung durch Variationen der Fehlklassifikationskosten fest.

Des Weiteren können unterschiedliche Sampling Strategien angewandt werden. Beim Under-sampling werden zum Erhalt eines ausgewogenen Datensatzes für jede Klasse nur die Anzahl der Objekte der kleinsten Klasse berücksichtigt. Beim Over-sampling können Datenpunkte aus unterrepräsentierten Klassen mehrfach verwendet werden. Oft wird Over-sampling von unterrepräsentierten Klassen mit Under-sampling von immer noch überrepräsentierten Klassen kombiniert. Mit der Synthetic Minority Oversampling Technique (SMOTE) [220] können synthetischer Datenpunkte erzeugt werden. Dadurch wird die Anzahl der Objekte für jede Klasse auf die Anzahl der größten Klasse erhöht. Zuerst wird ein zufälliger Datenpunkt einer unterrepräsentierten Klasse gewählt. Anschließend werden die k nächsten Nachbarn dieses Datenpunktes gefunden (k ist standardmäßig 5). Einer dieser Nachbarn wird zufällig ausgewählt und im Merkmalsraum wird ein synthetischer Datenpunkt an einem zufällig ausgewählten Punkt zwischen den beiden Datenpunkten generiert. SMOTE kann auch mit einem Under-sampling der überrepräsentierten Klassen kombiniert werden.

Die genannten Sampling-Strategien wurden in Vorversuchen verglichen. Eine Übersicht der Klassifizierungsergebnisse findet sich im Anhang (10.7). Die Vorversuche zeigten keinen negativen Effekt beim direkten Verwenden der unausgewogenen Daten, d.h. es konnte kein Bias

des Klassifikators festgestellt werden. Dies deckt sich mit den Ergebnissen von Japkowicz et al. [221], laut denen eine SVM weniger anfällig gegen unausgewogene Daten ist als andere ML-Algorithmen. Beim Anwenden des Under-sampling sowie einer Kombination von Over- und Under-sampling wurden schlechtere Ergebnisse als beim direkten Verwenden der unausgewogenen Daten erreicht. Durch das Anwenden von SMOTE konnte keine signifikante Verbesserung erzielt werden. Daher werden im Folgenden die Klassifizierungsergebnisse anhand der unausgewogenen Daten präsentiert.

7.3.2 Klassifizierungsstrategie

Verschiedene Klassifizierungsstrategien sind denkbar. Zum einen können alle sieben Klassen auf einmal klassifiziert werden. In Anbetracht der Komplexität der Strukturen der sieben Klassen könnte es für einen ML-Algorithmus schwierig sein, alle Klassen auf einmal zu unterscheiden, weshalb auch hierarchische Klassifizierungen vielversprechend erscheinen. Bei solchen hierarchischen Klassifizierungen werden zunächst die einfacheren Hauptklassen unterschieden (z. B. Perlit vs. Bainit vs. Martensit), bevor der Bainit weiter in Unterklassen unterteilt wird. In Vorversuchen ergaben sowohl hierarchische Klassifizierungen als auch das gleichzeitige Klassifizieren aller Klassen vergleichbare Genauigkeiten. Im Ergebnisteil wird sich daher auf das gleichzeitige Klassifizieren aller Klassen beschränkt. Eine Gegenüberstellung der Strategien findet sich im Anhang (10.8).

7.3.3 Modell-Training

Das Training der ML-Modelle erfolgte in MATLAB mit der Classification Learner App [222]. Eine SVM wurde als ML-Algorithmus ausgewählt, da sie in Vorarbeiten als geeigneter Klassifikator etabliert wurde [205,223] und andere Algorithmen bei Vorversuchen geringere Genauigkeiten als eine SVM erreichten. Vor dem Trainieren werden alle Daten standardisiert (Zentrieren um den Mittelwert). Beim Trainingsprozess wird eine 5-fache Kreuzvalidierung angewandt. Zunächst werden alle 72 Parameter (nach Entfernen korrelierender Merkmale) zum Modelltraining berücksichtigt. Anschließend erfolgt ein Merkmals-Ranking und eine Merkmals-Auswahl mit Hilfe des „minimum redundancy maximum relevance“ (MRMR) Algorithmus. Dieser Algorithmus ist zum Merkmals-Ranking bei Klassifizierungsproblemen gedacht. Er findet einen optimalen Satz von Merkmalen, die sich gegenseitig maximal unähnlich sind und die Antwortvariable effektiv darstellen können, indem die Redundanz eines Merkmalssatzes minimiert und die Relevanz eines Merkmalssatzes für die Antwortvariable maximiert werden

[224]. Danach werden die Hyperparameter optimiert. Dies geschieht automatisiert in der MATLAB Classification Learner App mit einer Bayes Optimierung [225].

In der Literatur werden für eine SVM überwiegend die Hyperparameter C und γ betrachtet. C ist ein Maß für die „soft-margin“ Hyperebene, die den Grad der tolerierbaren Fehlklassifizierungen bestimmt [120]. Der Parameter γ ist lediglich bei der Verwendung eines RBF-Kernels relevant. Beim Modelltraining in der MATLAB Classification Learner App werden folgende Hyperparameter berücksichtigt: Kernel-Funktion, multi-class Methode und Box Constraint Level. Die Kernel-Funktion bestimmt, in welchen höherdimensionalen Raum ein lineares Problem transformiert wird (siehe 2.3.1.1), die multi-class Methode bestimmt, ob eine Klasse jeweils nur von einer anderen Klasse (One-vs-One), oder gleichzeitig von allen Klassen (One-vs-All) unterschieden wird. Der Box Constraint Level entspricht dem Parameter C aus der Literatur. Alle Modelle werden am Testsatz evaluiert und miteinander verglichen.

7.4 Ergebnisse und Diskussion

Aufgrund der unausgewogenen Klassen ist die Klassifizierungsgenauigkeit keine geeignete Metrik zur Beurteilung, da der Einfluss unterrepräsentierter Klassen im Vergleich zu den überrepräsentierten Klassen gering ist [226]. Das Betrachten der gesamten Konfusionsmatrix und daraus abgeleiteter Metriken wie Class Precision, Class Recall oder F1 Score ist dagegen besser geeignet [227].

Die Konfusionsmatrix des finalen Modells, evaluiert am Testsatz, nach Merkmals-Auswahl und Hyperparameter-Optimierung ist in Tabelle 7-4 dargestellt.

Tabelle 7-4: Konfusionsmatrix des finalen Modells, evaluiert am Testsatz.

		Accuracy = 82,9 %, F1 Score = 82,4 %							
		Vorhersage							
		P	DP	DC	ITP	OB	UB	M	Precision [%]
Grund- wahrheit	P	148	3	1	2	1	0	0	96,1
	DP	7	33	19	5	0	0	0	50,8
	DC	0	11	156	16	3	3	3	81,3
	ITP	0	5	26	129	0	1	10	75,4
	OB	0	0	3	0	39	1	0	90,7
	UB	0	0	3	1	1	40	0	88,9
	M	0	1	0	7	0	0	102	92,7
Recall [%]		95,5	62,3	75,0	80,6	88,6	88,9	88,7	
F1 Score [%]		95,8	55,9	78,0	77,9	89,7	88,9	90,7	

Eine Genauigkeit von 82,9 % und ein F1 Score von 82,4 % wurden erreicht. Die besten 40 Merkmale gemäß MRMR-Merkmal-Ranking wurden verwendet. Folgende SVM-Parameter wurden genutzt: eine quadratische Kernel-Funktion, one vs. one Multiclass Methode, Box Constraint Level von 1,6298. Die Konfusionsmatrizen der Modelle vor Merkmalsauswahl und Hyperparameter Optimierung werden im Anhang aufgeführt (10.9).

Für eine fundierte Interpretation von Klassifizierung und Konfusionsmatrix müssen auch die Fehlklassifizierungen betrachtet werden (Abbildung 7-20).

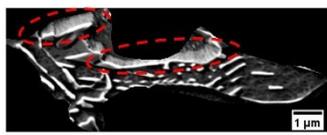
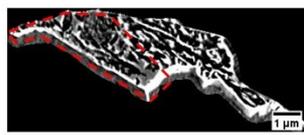
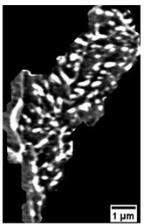
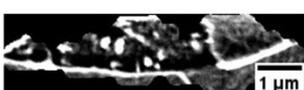
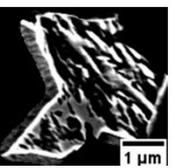
Modell	P	Modell	ITP	Modell	M	Modell	UB
Label	DP	Label	DP	Label	ITP	Label	DC
(a)		(b)		(c)		(d)	
							
Modell	DC	Prediction	DP	Modell	DC	Modell	DP
Label	DP	Label	DC	Label	ITP	Label	ITP
(e)		(f)		(g)		(h)	
							

Abbildung 7-20: Auswahl an Fehlklassifizierungen.

Hohe F1 Scores werden für die Klassifizierung von Perlit, Martensit, oberem und unterem Bainit erreicht. Die Verwechslungen zwischen Perlit und degeneriertem Perlit sind verständlich, da es schwierig sein kann, zu definieren, was noch eine reguläre, kontinuierliche Lamelle ist (Perlit), und ab wann es sich um eine „degenerierte“, unvollständige Lamelle handelt (Abbildung 7-20a). Dieser Aspekt wird durch die Erscheinung der Lamellen in Abhängigkeit von ihrer Orientierung zur Probenoberfläche noch verstärkt. Eine reguläre Lamelle oder Korngrenze, schräg angeschnitten, kann irregulär oder sogar ähnlich zu M/As erscheinen (rote Kreise in Abbildung 7-20b). Fehlklassifizierungen treten auch bei Martensit und ITP auf. Auch das erscheint plausibel, da die M/A Bereiche eines ITP martensitischen Strukturen ähneln können (rote Kreise in Abbildung 7-20c). Verwechslungen zwischen oberem und unterem Bainit treten dagegen kaum auf. Stattdessen gibt es Verwechslungen mit DC. In Bezug auf Morphologie und Anordnung innerhalb des Objektes, können Karbidpartikel eines DC-Objektes ähnlich aussehen wie in

oberem oder unterem Bainit, auch wenn diese Objekte wegen der fehlenden Lattengrenzen kein oberer oder unterer Bainit sind.

Insgesamt tritt der Großteil der Fehklassifizierungen bei den Klassen DP, DC und ITP auf. Dies erscheint verständlich, da sich diese Klassen untereinander ähneln und verglichen mit anderen Klassen schwächere Klassengrenzen zeigen. So ist bspw. der Übergang von DP zu DC fließend und schwierig zu definieren, wann ein Karbidpartikel noch eine irreguläre Lamellenform hat und wann es sich schon um ein „Bruchstück“ handelt (Abbildung 7-20e, f). Auch ITP-Objekte können zusätzlich zum M/A-Anteil Karbidpartikel aufweisen, die DC oder DP ähneln. Ist der M/A-Anteil des ITP nicht sehr stark ausgeprägt, erscheint es sinnvoll, dass diese Objekte fälschlicherweise als DC oder DP klassifiziert werden (Abbildung 7-20g, h). Alles in allem ist es plausibel, dass diese Aspekte nicht nur für Experten schwierig zu beurteilen, sondern auch schwierig für ein ML-Modell zu erlernen sind.

Werden die drei ähnlichen, schwierig zu unterscheidenden Klassen DP, DC, ITP zu einer Klasse, den „granularen bainitischen Strukturen“, zusammengefasst, steigt der F1 Score auf 93,2 %. Damit drängt sich natürlich die Frage auf, ob dieser Detailgrad der Bainit-Unterscheidung überhaupt notwendig ist, auch in Anbetracht der Kontroversen und Uneinigkeit zwischen Experten [14,20]. Bevor diese Frage beantwortet werden kann, müssen diese Bainit-Unterklassen aber zunächst erfassbar werden und mit mechanischen Eigenschaften von industriellen Stahlgüten korreliert werden. Das in der vorliegenden Arbeit vorgestellte Klassifizierungsmodell erlaubt dies zum ersten Mal.

Durch eine Merkmals-Auswahl konnte der F1 Score von 81,0 auf 81,7 % verbessert werden, durch die Hyperparameter Optimierung anschließend auf 82,4 %. Eine Übersicht der einzelnen Klassifizierungsergebnisse befindet sich im Anhang (10.9). Diese vergleichsweise geringen Verbesserungen legen nahe, dass bei der betrachteten Gefügeklassifizierung diese konventionellen ML-Aspekte einen geringeren Hebel zur Verbesserung der Klassifizierung darstellen als ein sorgfältiges materialwissenschaftlich-orientiertes Feature Engineering.

Die 40 verwendeten Merkmale (Top 40 des MRMR-Merkmal-Ranking) teilen sich auf in 13 Haralick Parameter, 9 LBP-Merkmale und 18 morphologische Parameter der Substruktur. Dies rechtfertigt die aufwendige Merkmals-Extraktion und das Mitführen dieser drei Parametergruppen. Die 15 wichtigsten Merkmale gemäß MRMR-Ranking sind in Tabelle 7-5 aufgelistet. Auch hier sind alle drei Parametergruppen vertreten.

Tabelle 7-5: Merkmals-Ranking des finalen Modells gemäß MRMR-Algorithmus.

Rang	Merkmal	Parametergruppe
1	Mittelwert Kontrast	Haralick
2	Mittelwert „info measure of correlation 2“	Haralick
3	Standardabweichung Aspektverhältnis	Morphologie
4	LBP R = 1, N = 8 bin 1	LBP
5	Standardabweichung konvexe Fläche/gefüllte Fläche	Morphologie
6	Mittelwert Sphärizität	Morphologie
7	Mittelwert „sum average“	Haralick
8	Standardabweichung Ellipsen-Hauptachse	Morphologie
9	Gesamte Substrukturfläche	Morphologie
10	Amplitude „inverse difference“	Haralick
11	Standardabweichung Rundheit	Morphologie
12	Mittelwert Energie	Haralick
13	LBP R = 6.2, N = 16 bin 4	LBP
14	Standardabweichung Ellipsen-Nebenachse	Morphologie
15	Mittelwert axial ratio	Morphologie

In Anbetracht der Datenmenge und der Vielfalt der betrachteten Strukturen, ist es schwierig, die Gefüge mit den extrahierten Merkmalen zu korrelieren und deren Relevanz für die Klassifizierungsgenauigkeit zu diskutieren. Gerade weil es für den Menschen nahezu unmöglich ist, die Strukturen in großen, hochdimensionalen Datenmengen zu erfassen, werden Methoden des maschinellen Lernens zum Auswerten dieser Daten und dem Erstellen der Klassifizierungsmodelle verwendet. Zusätzlich kann die Interpretation von Bildtexturparametern schwierig und wenig intuitiv sein. Dennoch sollte versucht werden, die wichtigsten Merkmale in Bezug auf die unterschiedlichen Gefügeklassen zu interpretieren, um ein besseres materialwissenschaftliches Verständnis und eine bessere Bewertung zu ermöglichen, auch wenn es sich dabei mehr um Annahmen als um überprüfbare Schlussfolgerungen handelt.

Die Unterschiede der sieben Gefügeklassen liegen letztlich hauptsächlich in der Größe, Form und Anordnung der Karbide innerhalb der Zweitphase Objekte. Der Haralick Parameter Kontrast ist ein Maß für die lokalen Variationen in einem Bild [84]. Geringe Kontrast-Werte bedeuten weniger lokale Variationen im Bild. Hat ein Zweitphase-Objekt also wenig Substruktur, d.h. wenige Karbidpartikel innerhalb des Objektes, dafür aber größere Ferritanteile, dann führt dieser dunkle, gleichmäßige „Hintergrund“ aus Ferrit zu einem insgesamt niedrigeren Kontrast Wert. Dies kann zutreffend sein für die Klassen DC oder OB.

Die morphologischen Kenngrößen der Karbidpartikel wie Größe und Form beschreibende Parameter werden in Form von Mittelwert und Standardabweichung der logarithmischen Verteilung der Werte aller Partikel im Objekt erfasst. Die Standardabweichung eines Parameters

ist sehr aufschlussreich, da sie die Gleichmäßigkeit der Partikel im Hinblick auf einen bestimmten Parameter erfassen kann. Die Standardabweichungen von Aspektverhältnis, der Ellipsen-Hauptachse oder der Rundheit sollten für oberen Bainit (überwiegend längliche Karbide auf den Lattengrenzen) geringer sein als für unteren Bainit (überwiegend kleine Karbide innerhalb der Latten, aber teilweise auch größere Karbide auf den Latten- oder Objektgrenzen). Standardabweichungen beim Martensit sollten auch geringer sein, da es weniger individuelle Partikel gibt, sondern eher verbundene Strukturen wie ein Netzwerk. Mittelwerte von Sphärizität und Axialverhältnis sollten in der Lage sein, die durchschnittliche Form der Partikel und damit Unterschiede zwischen lamellaren Strukturen wie in Perlit und kleineren Ausscheidungen wie in unterem Bainit oder in der Klasse Zementit-Bruchstücke zu erfassen. Die gesamte Substrukturfläche im Objekt, d.h. die Summe der Flächen aller Partikel im Objekt, kann geeignet sein, ITP- oder DC-Objekte zu erfassen, da diese oft kleineren Objekte i.d.R. weniger Substruktur aufweisen als überwiegend große Partikel von oberen und unterem Bainit oder Martensit.

LBP sind zum Detektieren kleiner, feiner Details in Bildern, wie Kanten, Ecken oder Punkten, geeignet [228]. Im LBP-Histogramm können verschiedene Bins zum Vergleichen und Klassifizieren der Gefüge verwendet werden. Durch Verwenden eines „uniform LBP“ können die Länge des Histogramms und damit die Effizienz eines dieses LBP nutzenden Klassifikators verbessert werden [89,229]. In diesem „uniform LBP“ entspricht Bin 0 hellen Punkten, Bin 1 bis 7 entsprechen Kanten und Ecken unterschiedlicher Krümmung [89]. Daher erscheint es plausibel, dass LBP die Unterschiede in Größe, Form und Anordnung der Karbide in den unterschiedlichen Gefügeklassen erfassen können. Insgesamt erscheinen Verwendung und Auswahl der wichtigsten Merkmale in Übereinstimmung mit einer rein materialwissenschaftlichen Bewertung. Diese eher abstrakten und herausfordernden Interpretationen zeigen jedoch auch die Notwendigkeit einer „explainable AI“ (dt. erklärbare künstliche Intelligenz) auf.

In der Literatur finden sich ML-Klassifizierungen mit Genauigkeiten im Bereich von 90-95 %. Mehr als 95-97 % Genauigkeit wird im ML-Benchmarking oft als „übermenschliche Leistung“ (engl. superhuman performance) angesehen [230]. Daher ist es wichtig, die in dieser Arbeit erreichte Genauigkeit von 82,9 % korrekt einzuordnen. Zunächst ist anzumerken, dass sich diese Genauigkeit auf die Anzahl korrekt klassifizierter Zweitphase Objekte bezieht. Diese Objekte sind allerdings unterschiedlich groß. Bezieht man die Genauigkeit nicht mehr auf die Anzahl, sondern die Fläche der Objekte, erhöht sie sich auf 89,2 %. Weiterhin stellt sich die Frage, welche Genauigkeit einem übermenschlichen Abschneiden bei einer Bainit-Klassifizierung entspricht. 95 % Genauigkeit bei den Alltagsgegenständen von ImageNET als übermenschliche Leistung angenommen, ist für die Klassifizierung einiger der komplexesten Stahlgefügestrukturen sicher

eine geringere Grenze anzunehmen. Da die Beurteilung bainitischer Gefüge auch stark von Vorwissen und Erfahrungsschatz des Experten abhängig ist und leicht Uneinigkeit zwischen Experten entstehen kann, wie der Ringversuch zeigt (siehe 7.1), sollte nicht mehr als 75% Genauigkeit als menschliche Leistung angenommen werden.

In Anbetracht der Komplexität einer Bainit Klassifizierung sowie deren Evaluierung erscheint eine Klassifizierungsgenauigkeit von 100 % generell unrealistisch, und eine „inhärente Unsicherheit“ einer Bainit Klassifizierung sollte erwartet werden. Gründe für diese Unsicherheit sind insbesondere nicht eindeutige Beurteilungen verschiedener Experten, die Wahl des Klassifizierungsschemas und in Anbetracht von kontinuierlichen Übergängen zwischen Klassen auch die Definition von Klassen und Klassengrenzen.

Generell erschwert die Vielzahl an Klassifizierungsschemata (siehe 2.1.1, 10.1) das Finden eines gemeinsamen Konsenses zur Beschreibung und Beurteilung bainitischer Gefüge. Da so viele Bezeichnungen verfügbar sind, aus denen die ausgesucht werden könnten, die am besten zu den vorliegenden Gefügen passen, können auch schnell viele weitere Klassifizierungssysteme entstehen. Dies führt u.a. zu ähnlichen, dennoch unterschiedlichen Bezeichnungen für dieselben Gefüge. Regelmäßig finden sich auch abstrakte Begriffe und Beschreibungen ohne echt Gefüge-Beispiele oder schematische Zeichnungen. Zusätzlich treten auch Inkonsistenzen innerhalb eines Schemas auf (z.B. Bainit als Zweitphase des granularen Bainits im Schema nach Zajac et al. [10]). Im Grunde existieren zwei Arten von Klassifizierungsschemata. Das erste Konzept beschreibt die Anordnung von Ferrit und C-reicher Zweitphase als Ganzes mit einem integralen Ausdruck, das zweite beschreibt und klassifiziert Ferrit und C-reiche Zweitphase separat. Prominentestes Beispiel für das erste Konzept ist das Schema nach Zajac [10], für das zweite das nach Gerdemann bzw. Song ([12,24], siehe 10.1). Beide Konzepte haben Vor- und Nachteile. Das nach Gerdemann und Song mag zwar eine weitestgehend wertfreie Beschreibung und sehr detaillierte Erfassung der Gefügebestandteile liefern, der letztlich dafür generierte Buchstabencode ist im allgemeinen Sprachgebrauch und für die Verwendung von Korrelationen jedoch nicht praktikabel. Außerdem müssten bei einer Klassifizierung Ferrit und C-reiche Zweitphase auch separat erfasst werden, was zusätzliche Anforderungen an Merkmalsextraktion und Klassifizierung stellt. Das Schema nach Zajac zeigt sich als besser geeignet. Zwar gibt es auch Nachteile, z.B. dass viele Gefüge unter den Begriffen granularer Bainit, Zementit-Bruchstücke oder Produkte unvollständiger Umwandlung zusammengefasst werden. Diese Gefügeklassen haben allerdings ihre Berechtigung, da sie viele Erscheinungsformen zusammenfassen, die sonst nur schwer zu beschreiben sind. Die integrale Bezeichnung ist allerdings nicht nur im allgemeinen Sprachgebrauch leichter gebräuchlich und direkt zur Verwendung in Prozess-Gefüge-Eigenschafts-Korrelationen geeignet, also anwendungsorientierter, sondern auch besser in einer

ML-basierten Klassifizierung umzusetzen. Außerdem ist nach der Klassifizierung nach Zajac noch eine weitere Auswertung möglich, z.B. Anteile an Ferrit und C-reicher Zweitphase oder Größe und Form der Karbidausscheidungen, sodass letztlich dennoch ein ähnlicher Detailgrad wie nach Gerdemann und Song erreicht werden kann.

Eine Herausforderung, unabhängig vom final verwendeten Schema, sind die strikt definierten Klassen des jeweiligen Schemas, welche bei der Zuordnung der Grundwahrheit und im ML-Algorithmus abgebildet werden müssen. Klassengrenzen werden in den Schemata jedoch selten vorgegeben, stattdessen gibt es oft fließende Übergänge zwischen den Klassen. Das Zuordnen in strikte Klassen einerseits, ohne klar definierte Klassengrenzen andererseits, wird in einer gewissen Unsicherheit in der endgültigen ML-Klassifizierung resultieren, selbst wenn der Prozess der Zuordnung der Grundwahrheit, wie in der vorliegenden Arbeit, durch Ringversuche, Referenzproben und eine korrelative Charakterisierung so fundiert und objektiv wie möglich erfolgte.

In der Literatur finden sich nur wenige Arbeiten, die bei einer Gefügeklassifizierung ebenfalls mehrere Bainit-Unterklassen berücksichtigen. Darüber hinaus wird die Zuordnung der Grundwahrheit oft nicht ausführlich genug diskutiert [4,154,155,183,184]. Teilweise gibt es Arbeiten, die gar keine Gefügaufnahmen zeigen [184] oder nicht in ausreichender Auflösung bzw. Vergrößerung, des Öfteren werden auch fragwürdige Klasseneinteilungen getroffen [4,154,183]. Daher fällt eine Einordnung der in dieser Arbeit erzielten Ergebnisse in den Stand der Technik schwer. Tsutsui et al. [94] verwenden ebenfalls Haralick-Texturparameter in Kombination mit konventionellem ML zur Klassifizierung von martensitisch-bainitischen Gefügen. Die Gefügaufnahmen werden in Einzelteile zerlegt und nachfolgend klassifiziert. Eine Genauigkeit von 87,5 % wird erreicht. Berücksichtigte Klassen sind Martensit, oberer Bainit und unterer Bainit. Mischgefüge werden allerdings auch als eigene Klasse definiert, und zusätzlich auch noch weitere Klassen für unterschiedliche Phasenverhältnisse in diesen Mischgefügen. Letztlich wird so praktisch für jede separate Probe eine Klasse definiert, was nur bedingt zielführend ist und i.d.R. keine vollständig objektive Gefügeklassifizierung ermöglicht.

Im Vergleich zur Vorarbeit von Gola [205] konnte in der vorliegenden Arbeit insbesondere die Datenaufteilung und Datenvorverarbeitung durch die Nutzung der MATLAB Classification Learner App einfacher und automatisierter gestalten werden. So wird durch den insgesamten Fortschritt und Weiterentwicklungen im Bereich KI und ML auch die Anwendung von ML benutzerfreundlicher. In das finale Modell von Gola zur Klassifizierung von Perlit, Bainit und Martensit gingen lediglich 16 Parameter ein. Das finale Modell dieser Arbeit ist mit 40 Parametern deutlich komplexer, was natürlich der deutlich schwierigeren Aufgabenstellung durch

die Berücksichtigung der Bainit-Unterklassen geschuldet ist. Eine Reduzierung dieses Modells auf lediglich 16 Parameter würde einen zu starken Abfall der Genauigkeit bewirken (von 82,4 % F1 Score auf 73,7 %). Ein Vergleich der signifikanten Merkmale ist nicht direkt möglich, da zum Teil unterschiedliche Parametergruppen verwendet wurden, die Klassifizierungsaufgabe anders ist und generell der Prozess der Modellbildung und Merkmalsauswahl zu einem gewissen Grad intransparent bleibt. Während in der Arbeit von Gola noch die drei Parametergruppen Objektmorphologie, Substrukturmorphologie und Haralick Texturparameter verwendet wurden, wurde in der vorliegenden Arbeit die Objektmorphologie nicht mehr berücksichtigt, stattdessen mit LBP eine weitere Klasse Texturparameter ergänzt. Die Objektmorphologie ist im Hinblick auf Probenorientierung und Prozessbedingungen die am wenigsten robuste Parametergruppe.

An dieser Stelle muss angemerkt werden, dass in der Vorarbeit von Gola der Parameter Substrukturdichte noch der Klasse Objektmorphologie zugeteilt war. Zwar wird dieser Parameter durch Dividieren durch die Objektfläche berechnet, die ein Parameter der Klasse Objektmorphologie ist, allerdings wird die Fläche der Substruktur, die dadurch dividiert wird, nur durch Auswertung der Substruktur in den REM-Aufnahmen zugänglich, sodass die Substrukturdichte ein Parameter der Klasse Substrukturmorphologie sein müsste. In Vorversuchen sollten die Ergebnisse von Gola (Klassifizierung in Perlit, Bainit, Martensit) nach dieser Umordnung des Parameters reproduziert werden. Dabei zeigte sich, dass die Genauigkeit, wenn lediglich Parameter der Objektmorphologie verwendet werden, im Vergleich zu Gola stark abnahm. Auch bei der Klassifizierung mit allen drei Parametergruppen zeigte sich kein Mehrwert durch die Berücksichtigung der Klasse Objektmorphologie. LBP wurden in der vorliegenden Arbeit neu zum Datensatz hinzugefügt, da sie in Vorarbeiten ihre Eignung zur Unterscheidung bainitischer Gefüge zeigten [206]. Würden lediglich die Klassen Substrukturmorphologie und Haralick verwendet, ist die Modell Genauigkeit geringer als mit der Berücksichtigung der Klasse LBP (bezogen auf Modelle vor Merkmalsauswahl und Hyperparameter-Optimierung: Genauigkeit: 80,3 vs. 81,2 %, F1 Score 79,2 vs. 81 %).

Auch mit diesen angepassten Parametern konnte die Genauigkeit der Klassifizierung in Perlit, Bainit und Martensit von Gola (ca. 97 %) im Wesentlichen reproduziert werden, im Rahmen des hierarchischen Klassifizierungsmodells (ca. 95 %). Die leicht schlechtere Genauigkeit kann darauf zurückgeführt werden, dass alle Label nochmal überarbeitet wurden.

Die Aufgabenstellung der Vorarbeit von Gola wurde auch von Azimi et al. [168] mittels DL, in Form einer semantischen Segmentierung, bearbeitet. Dabei konnten mit DL und konventionellem ML vergleichbare Genauigkeiten erzielt werden. Aufgrund der Vorteile des DL, z.B. das selbstständige Erlernen relevanter Merkmale, wurde es auch für die Umsetzung der Klassifizierung der Bainit-Unterklassen in Betracht gezogen. Allerdings zeigte sich der

objektweise Ansatz des konventionellen ML als vorteilhaft. Die größte Herausforderung dieser Bainit-Klassifizierung stellte die Zuordnung der Grundwahrheit dar. So gab es diverse Zweitphase-Objekte, die Strukturen mehrerer Klassen enthielten, oder bei denen sich Experten nicht einig waren. Beim Ansatz der objektweisen Klassifizierung mittels konventionellem ML konnten diese Objekte nach der Extraktion aller Objekte einfach herausgefiltert und nicht für das Modelltraining berücksichtigt werden. Beim DL gestaltet sich der Umgang mit diesen unsicheren Objekten jedoch deutlich komplexer, da der Input die gesamte Gefügaufnahme ist und nicht mehr die aus den gesammelten, relevanten Objekten extrahierten Gefügemerkmale. Damit diese unsicheren Objekte beim Training des DL-Modell nicht berücksichtigt werden, müssten sie entweder als separate Klasse betrachtet oder der Hintergrundmatrix zugeordnet werden. Dies kann den Trainingsprozess aber erschweren und verfälschen. Außerdem trat beim Modelltraining, im Gegensatz zum konventionellen ML (7.3.1), aufgrund der unausgewogenen Klassenverteilung ein Bias auf und die unterrepräsentierten Klassen OB und UB wurden lediglich unzureichend erkannt. Nach diesen Vorversuchen wurde DL für diese Aufgabenstellung nicht weiterverfolgt. Darüber hinaus ist das Modell des konventionellen ML tendenziell besser interpretierbar und einige der für die Klassifizierung extrahierten Gefügemerkmale (Morphologie der Substruktur) können direkt für eine Quantifizierung und Korrelationen genutzt werden.

Es ist noch einmal hervorzuheben, dass das Ziel dieser Aufgabenstellung eine objektive Gefügeanalyse ohne die Berücksichtigung von Hintergrundinformationen ist (wie sie z.B. in Abnahmeprüfungen erfolgt). Dieser Ansatz ist gegensätzlich zu anderen Arbeiten aus der Literatur, die oft Prozess-Gefüge- oder Gefüge-Eigenschaftskorrelationen behandeln, sodass für die jeweils betrachtete Stahlgüte eine qualitative Beschreibung der Gefüge oder eine Quantifizierung bereits mit Fokus auf Korrelationen erfolgt, und nicht die objektive Einteilung in ein bestimmtes, allgemeingültiges Klassifizierungsschema. Manche Arbeiten kommen gar zu dem Schluss, dass „ohne zusätzliche Informationen über Stahlsorte und Probengeschichte eine fehlerfreie Gefügeanalyse nicht zu gewährleisten ist“ ([170], S. 73). Zwar ist durchaus anzunehmen, dass unter Berücksichtigung von Prozessparametern eine Verbesserung der hier präsentierten Bainit-Klassifizierung möglich ist. Dadurch kann jedoch eine Voreingenommenheit entstehen. Daher lag der Fokus dieser Arbeit auf einer objektiven und rein auf Gefügaufnahmen basierenden Klassifizierung, um so alle potenziellen „externen“ Faktoren, die voreingenommen machen könnten, auszuschließen.

7.5 Demonstrator: Entwicklung von Bewertungsmetriken und Anwendung der ML-Klassifizierung in der industriellen Forschung

Bei einer finalen Serienanwendung der ML-Klassifizierung muss mit der diskutierten Unsicherheit der Bainit-Klassifizierung umgegangen und die Güte der Klassifizierung beurteilt werden können, ohne dass eine Grundwahrheit verfügbar ist. Dies kann mit Hilfe eines probabilistischen ML-Algorithmus realisiert werden (2.3.1). Die bisher verwendete SVM ist von sich aus zwar kein probabilistischer Klassifikator, kann durch das Fitten einer geeigneten „score-to-posterior-probability“ Transformation aber probabilistisch interpretiert werden [133]. Diese Transformation berechnet die a-posteriori-Wahrscheinlichkeit, dass eine Beobachtung in die positive Klasse klassifiziert wird. In MATLAB kann diese Transformation über die Funktion „fitSVMPosterior“ berechnet werden, basierend auf dem Ansatz von [133]. Diese a-posteriori-Wahrscheinlichkeit (Werte zwischen 0 und 1) kann als Vertrauenskriterium herangezogen werden. Schließlich kann ein Grenzwert für eine vertrauenswürdige Klassifizierung festgelegt werden. Aus diesen Wahrscheinlichkeiten können außerdem weitere Vertrauensmetriken, wie das Verhältnis der wahrscheinlichsten zur zweitwahrscheinlichsten Klasse, abgeleitet werden.

Eine Möglichkeit zur Erhöhung des Vertrauens in die Klassifizierung ist das Kombinieren mehrerer Modelle mit Hilfe eines Mehrheitsentscheids. Wie in 2.3.1.1 beschrieben, wird dies bereits innerhalb bestimmter Klassifikatoren ausgenutzt, z.B. beim Kombinieren mehrerer schwacher DT zu einem RF. Analog können auch Vorhersagen mehrerer Modelle kombiniert werden. D.h. ein Zweitphase-Objekt wird von mehreren Modellen klassifiziert und die häufigste Klassifizierung wird als Ergebnis übernommen.

Im hier vorgestellten Fall wurden drei Modelle verwendet. Das erste Modell ist die SVM zur gleichzeitigen Klassifizierung aller sieben Klassen (7.3.3), die ausführlich beschrieben und diskutiert wurde. Das zweite Modell ist eine SVM zur hierarchischen Klassifizierung, die zuerst die Hauptklassen Perlit, Bainit, Martensit klassifiziert, und die bainitischen Objekte anschließend weiter in Unterklassen unterteilt (7.3.2). Beide Klassifizierungsansätze sind sinnvoll und erreichten gute, ähnliche Ergebnisse, sodass eine Kombination naheliegend ist. Beide Modelle liefern über eine „score-to-posterior-probability“ Transformation probabilistischen Output. Als drittes Modell kommt ein einfaches ANN („fully connected“) zur Klassifizierung tabellarischer Daten zum Einsatz. Da es dabei in erster Linie darum ging, ein drittes Modell zu verwenden, wird es hier nur oberflächlich beschrieben und diskutiert. Dieses ANN wurde in der MATLAB Neural Net Pattern Recognition App trainiert [231]. Es besteht aus einer Eingabeschicht, einer Zwischenschicht mit sigmoidaler Transferfunktion und 20 versteckten Neuronen und einer Ausgabeschicht mit Softmax Funktion [231]. Der Softmax Layer des neuronalen Netzes kann ebenfalls probabilistisch interpretiert werden. Die drei Modelle erreichen, evaluiert am Testsatz,

Genauigkeiten von 82,9, 81,8 bzw. 80,9 %. Es wird angenommen, dass die Kombination der Modelle die Robustheit der Klassifizierung verbessert.

Wie im Abschnitt „Zuordnung der Grundwahrheit“ (7.2.2) beschrieben, gibt es relativ wenig klare Strukturen von oberem und unterem Bainit. Diese Gefüge, die nur schwer zu beurteilen sind, und daher auch nicht für die Modellbildung verwendet wurden, werden nun natürlich auch bei der Anwendung des ML-Modells auf neue, ungesehene Gefügebildungen auftreten. Da das ML-Modell nur mit klaren Strukturen trainiert wurde, kann jedoch davon ausgegangen werden, dass es bei Anwendung auf unklare oder gemischte Strukturen, bei denen sich Experten uneinig sind, generell eine objektive und reproduzierbare Entscheidung treffen wird. Im weiteren Verlauf dieses Demonstrators werden zusätzlich auch noch Ansätze präsentiert, um über die probabilistische Betrachtung die Klassifizierung dieser Art Gefüge noch weiter zu verbessern.

Der Klassifizierungsansatz mit Hilfe mehrerer ML-Modelle inklusive der Betrachtungen von Vertrauensmetriken wird im Folgenden anhand von zwei Anwendungsbeispielen illustriert: an einer Probe mit überwiegend klar zu beurteilender perlitischer Zweitphase sowie an einer Probe mit komplexen, schwierig zu beurteilenden bainitischen Strukturen. Als Vertrauensmetriken werden die Wahrscheinlichkeit der vorhergesagten Klassen (von nun als „confidence index“, CI, bezeichnet) und der Logarithmus des Verhältnisses von wahrscheinlichster zu zweitwahrscheinlichster Klasse (von nun als „quality index“, QI, bezeichnet) betrachtet.

Ausgangspunkt ist eine neue zu klassifizierende Gefügebildung. Die Definition der Objekte und die Merkmalsextraktion erfolgte wie in 7.2.1 und 10.5 beschrieben. Als Randobjekte wurden nicht alle Objekte betrachtet, die den Bildrand berühren, da dadurch viele große, zeilenförmig im Bild angeordnete Objekte entfernt würden. Stattdessen wurden Objekte, deren Schwerpunkt in einem Bereich von 100 px entlang des Bildrandes liegt, als Randobjekte gekennzeichnet und für Klassifizierung und Quantifizierung nicht berücksichtigt [205]. Jedes Zweitphase-Objekt wurde jeweils mit allen drei Modellen klassifiziert. Anschließend erfolgte die Mehrheitsentscheidung. Das Klassifizierungsergebnis kann farblich dargestellt und als Überlagerung mit der REM-Aufnahme ausgegeben werden. Abbildung 7-21 zeigt das Klassifizierungsergebnis der perlitischen Probe. Zur Beurteilung der Klassifizierung wurden mehrere Experten befragt. Diese stufen den Großteil der Klassifizierung der Zweitphase Objekte als korrekt ein. Die Zuordnungen von DP, DC und ITP erscheinen überwiegend plausibel. Lediglich einige kleine Objekte wurden fälschlicherweise als Martensit und oberer Bainit klassifiziert.

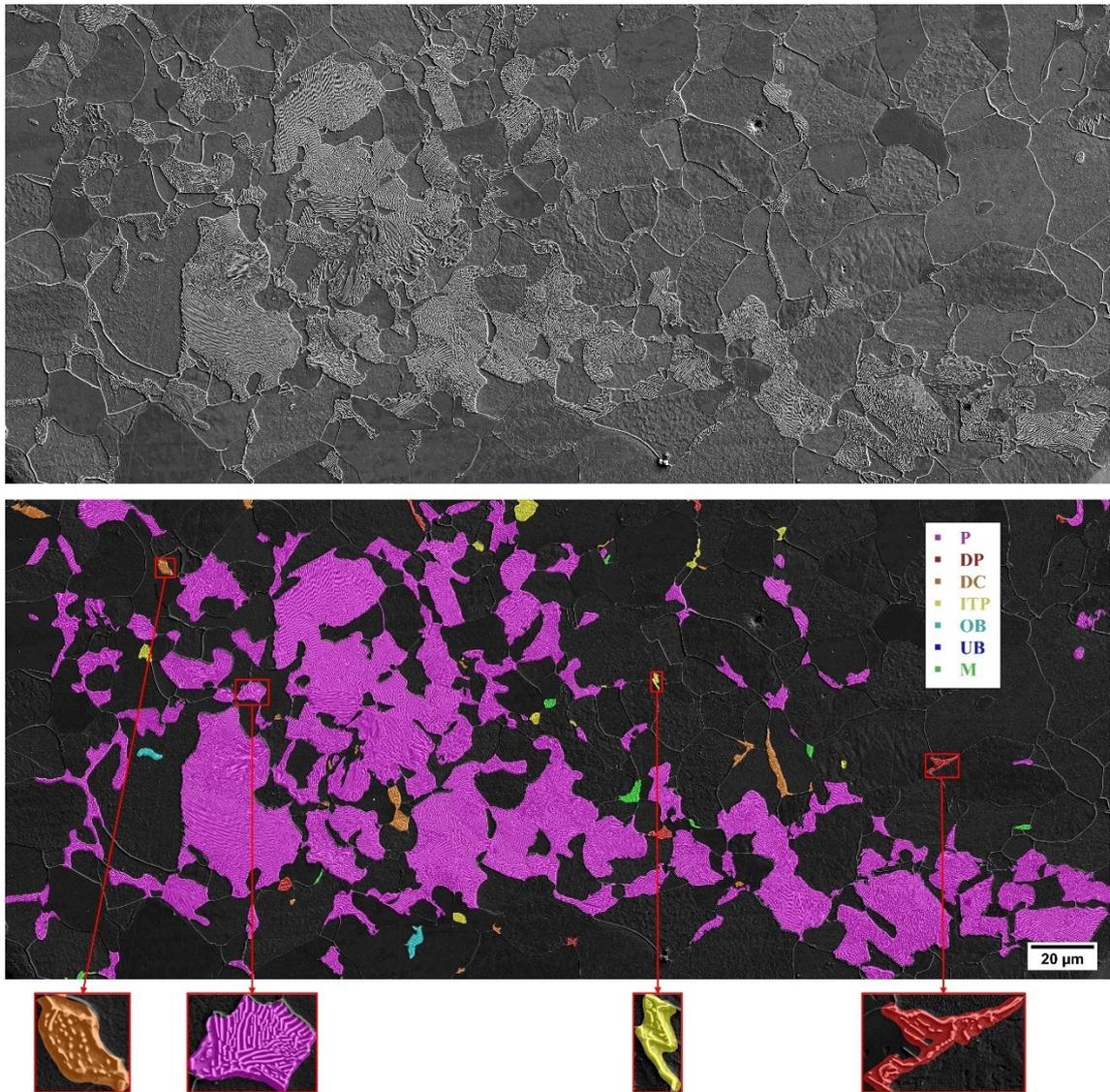


Abbildung 7-21: REM-Aufnahme der Probe 01543 (0.25), original und überlagert mit dem farbigen Klassifizierungsergebnis gemäß Legende.

Abbildung 7-22 zeigt das Klassifizierungsergebnis der bainitischen Probe. Auch hier entsprechen die Klassifizierungen überwiegend der Meinung der befragten Experten.

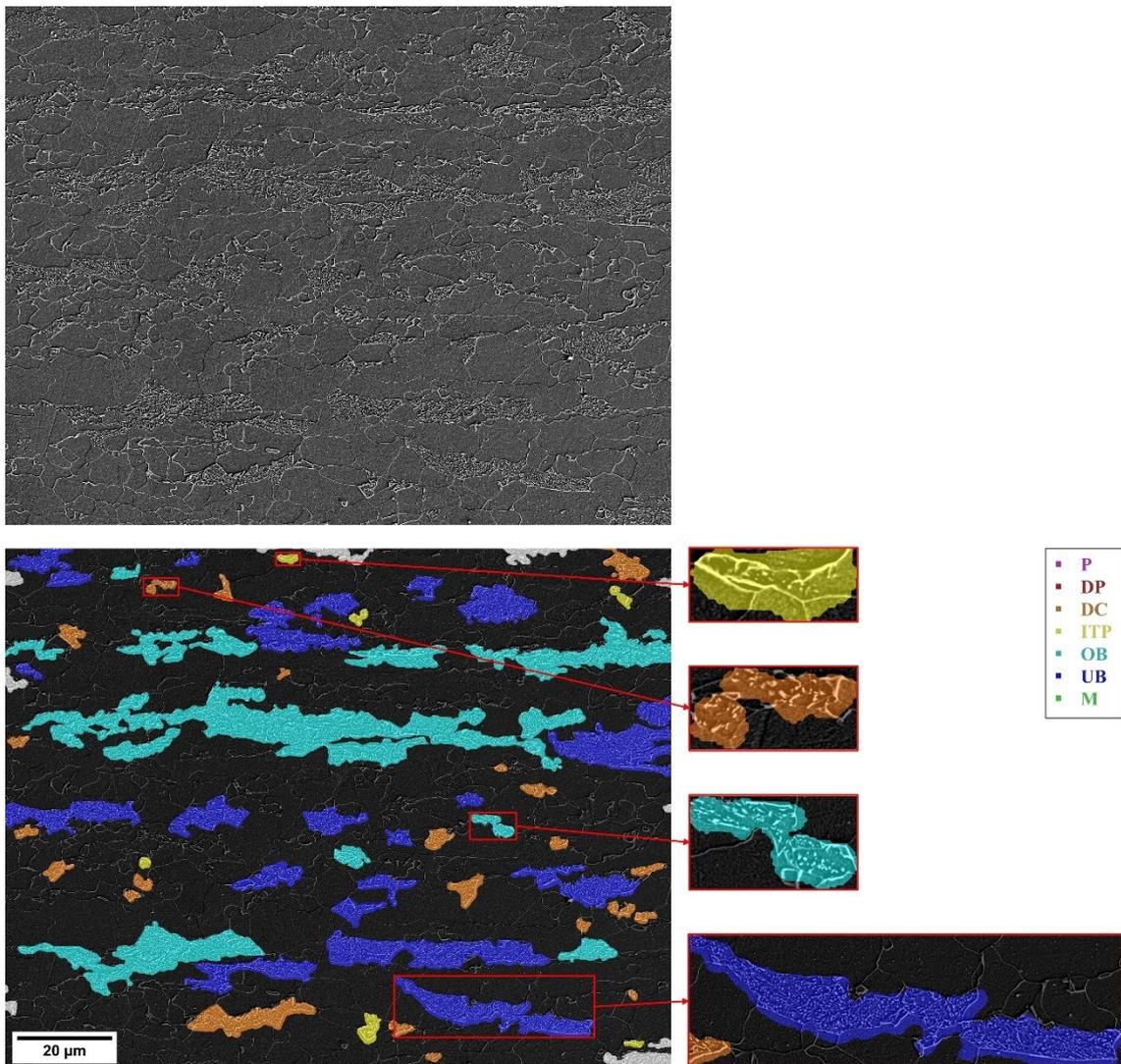


Abbildung 7-22: REM-Aufnahme der Probe Z518B (0.5-3_2,1), original und überlagert mit dem farbigen Klassifizierungsergebnis.

Tabelle 7-6 und Abbildung 7-23 zeigen beispielhaft einige Vorhersagen der Klassifizierungen der perlitischen Probe, inklusive der Gefüge und der Wahrscheinlichkeiten der vorhergesagten Klasse. Objekt 101 wurde von allen drei ML-Modellen mit hohem CI als Perlit klassifiziert. Das Gefüge ist zweifelsfrei perlitisch. Objekt 100 wurde von allen drei ML-Modellen als degenerierter Perlit angesehen, allerdings mit überwiegend niedrigem CI. Dies erscheint plausibel, da das Objekt Bereiche mit unterbrochenen Lamellen bzw. eher rundlichen Zementitausscheidungen zeigt, gleichzeitig aber auch reguläre Lamellenstrukturen aufweist. Objekt 102 wurde von den ML-Modellen unterschiedlich beurteilt, zweimal als Perlit, einmal als ITP. Bei diesem Zweiphasen Objekt handelt es sich um Perlit, allerdings gibt es Bereiche, die M/As ähneln, sodass die falsche Beurteilung als ITP zumindest teilweise nachvollziehbar erscheint. Die finale Einteilung in die korrekte Klasse Perlit erfolgte letztlich über den Mehrheitsentscheid.

Tabelle 7-6: Ausgewählte Vorhersagen und Vorhersagewahrscheinlichkeiten der drei Modelle und des Mehrheitsentscheids bei der perlitischen Probe.

Objektnr.	Modell 1	Modell 2	Modell 1	CI 1	CI 2	CI 3	Vorhersage	CI MW
100	DP	DP	DP	0.8483	0.3415	0.3861	DP	0.5253
101	P	P	P	1.0000	0.9999	0.9970	P	0.9990
102	ITP	P	P	0.9277	0.9066	0.4627	P	0.7657

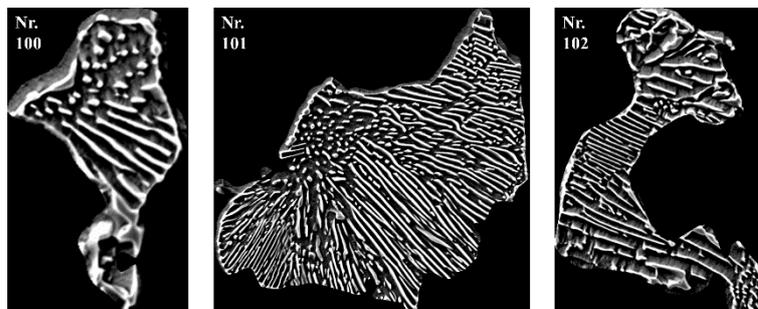


Abbildung 7-23: Zu Tabelle 7-6 zugehörige Gefügebildungen der Zweitphase Objekte.

Analog zum Mehrheitsentscheid der Klassen können auch die Vorhersagewahrscheinlichkeiten und daraus abgeleitete Vertrauensmetriken gemittelt werden. Die CI- und QI-Werte aller Objekte können zu einer Werteverteilung zusammengefasst werden. Diese Verteilungen können insgesamt für alle Objekte und gesondert pro Gefügeklasse als Histogramm dargestellt werden (Abbildung 7-24). Dies erlaubt auch ohne Kenntnis der Grundwahrheit eine Beurteilung der Güte der Klassifizierung. Während die klar einzuteilende perlitische Probe einen großen Anteil hoher CI-Werte aufweist, hat die herausfordernde bainitische Probe mehr CI-Werte im mittleren Bereich. Dementsprechend wäre das Vertrauen in diese Klassifizierung geringer.

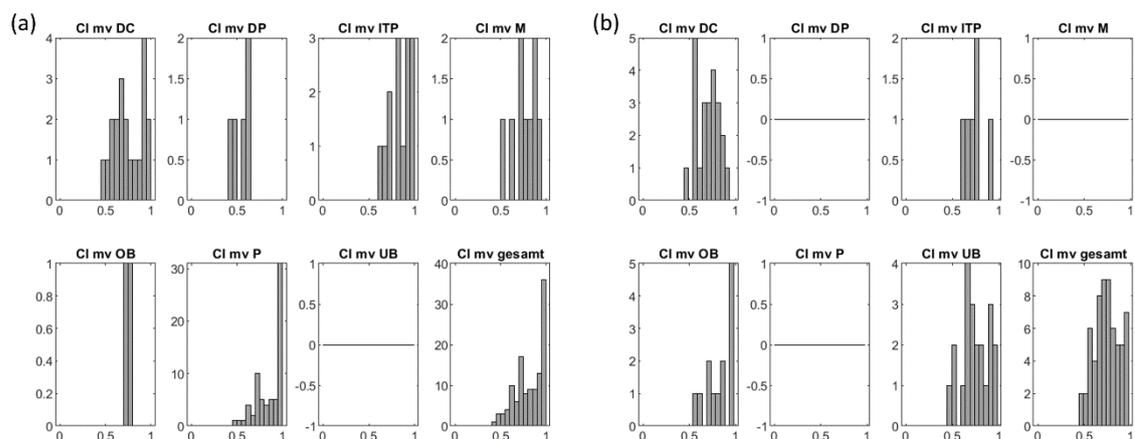


Abbildung 7-24: Werteverteilung des Confidence Index der Klassifizierungen der perlitischen Probe (a) und der bainitischen Probe (b).

Über ein Auftragen des CI-Wertes gegen die Fläche jedes Zweitphase Objektes kann die Güte der Klassifizierung ebenfalls evaluiert werden (Abbildung 7-25). Objekte mit einer kleinen Fläche führen zu einem vergleichsweise geringen Fehler der Phasenanteile. Dementsprechend sind kleine, unsicher klassifizierte Objekte weniger kritisch. Die perlitische Probe zeigt viele Objekte mit hohem CI, die bainitische Probe weist dagegen weniger davon auf. Dementsprechend zeigt sich auch hier die bessere Güte der Klassifizierung der perlitischen Probe.

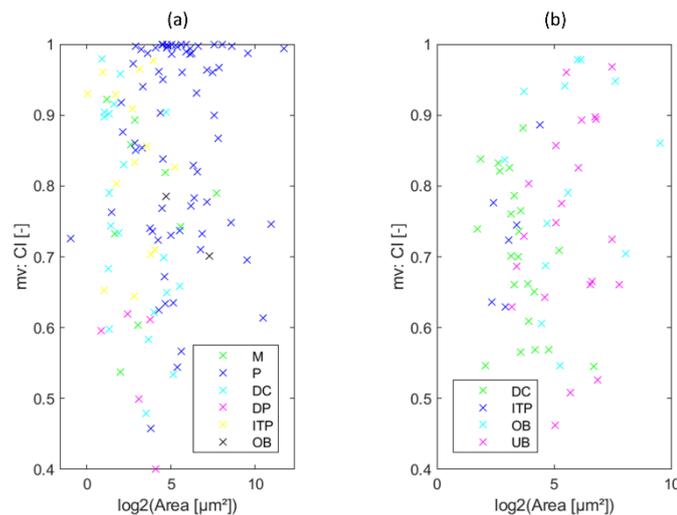


Abbildung 7-25: Auftragung des Confidence Index gegen die Fläche für jedes Zweitphase Objekt. (a) perlitische Probe, (b) bainitische Probe.

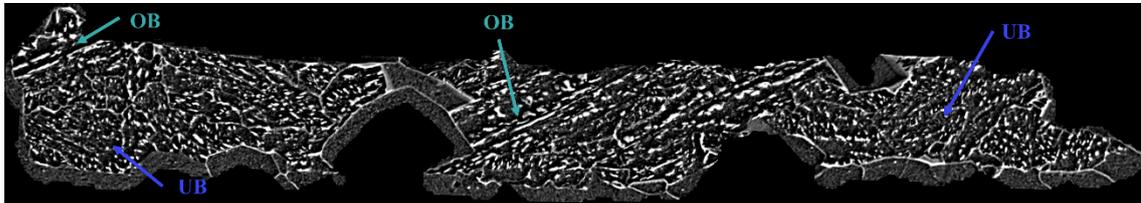
Wird ein Grenzwert für einen minimalen CI und ggfs. für die Objektfläche festgelegt, können Objekte, die diese Grenzwerte nicht erfüllen, automatisiert gesammelt und einem Experten zur Überprüfung übergeben werden. Anzahl oder Flächenanteil dieser unsicheren Objekte können ebenso zur Evaluierung der Güte der Klassifizierung herangezogen werden. Tabelle 7-7 zeigt Anzahl und Fläche unsicherer Objekte für die perlitische und bainitische Probe (Grenzwerte: $CI < 0,70$, Fläche $> 5 \mu\text{m}^2$). Der höhere Flächenanteil unsicherer Objekte der bainitischen Probe spiegelt auch in diesem Fall die bessere Qualität der „einfacheren“ Klassifizierung der perlitischen Probe wider.

Tabelle 7-7: Anteile unsicher klassifizierter Zweitphase Objekte in der perlitischen und bainitischen Probe, bezogen auf Anzahl und Fläche.

Probe/ Zweitphase	Anteil unsicherer Objekte (Anzahl)	Anteil unsicherer Objekte (Fläche)
Perlitisch	13,1 %	10,0 %
Bainitisch	9,5 %	19,3 %

Abbildung 7-26 zeigt ein Beispiel einer „unsicheren“ Klassifizierung eines bainitischen Zweitphase Objektes mit den Wahrscheinlichkeiten jeder Klasse. Das Zweitphase Objekt enthält

sowohl Strukturen von oberem als auch unterem Bainit. Mit 69,3 % wurde das Objekt als unterer Bainit klassifiziert. Die zweitwahrscheinlichste Klasse ist oberer Bainit mit 18,6 %.



	DC	DP	ITP	M	OB	P	UB
SVM	0.041	0.022	0.028	0.014	0.186	0.016	0.693

Abbildung 7-26: Bainitisches Zweiphasen Objekt mit charakteristischen Gefügemerkmalen von OB und UB und den vorhergesagten Wahrscheinlichkeiten jeder Gefügeklasse.

Anhand der Klassifizierung der Zweiphasen Objekte können nun die Phasenanteile berechnet werden. Durch die probabilistische Klassifizierung mit mehreren ML-Modellen können dabei auch Intervalle der Phasenanteile im Sinne einer Messunsicherheit abgeleitet werden.

Einerseits können die Phasenanteile gemäß den Vorhersagen der drei verschiedenen ML-Modelle berechnet werden. Dabei ist es allerdings auch möglich, die vorhergesagten Wahrscheinlichkeiten als Phasenanteile des Objektes zu interpretieren. Dementsprechend bestünde das Objekt in Abbildung 7-26 zu 69,3 % aus unterem Bainit, 18,6 % oberem Bainit usw. Bei klar vorhergesagten Objekten mag dies zwar zu einem Unterschätzen der Phasenanteile führen, bei unsicher klassifizierten Objekten mit Strukturen mehrerer Klassen erscheint dieser Ansatz nach dem Sichten bisheriger Ergebnisse jedoch plausibel. Eine Verbesserung wäre möglich, wenn die vorhergesagten Wahrscheinlichkeiten nur als Phasenanteile des Objektes interpretiert werden, wenn es einen gewissen CI unterschreitet, oder wenn Vorhersagewahrscheinlichkeiten einer Klasse kleiner 10% nicht für die Phasenanteile berücksichtigt werden.

Diese Berechnungen ergeben sechs Phasenanteile (1x über vorhergesagte Klasse, 1x über vorhergesagte Wahrscheinlichkeiten, jeweils für drei ML-Modelle). Daraus können der Mittelwert sowie Maximum und Minimum als mögliches Intervall des Phasenanteils berechnet werden. Darüber hinaus kann der Phasenanteil auch als einzelner Wert basierend auf dem Mehrheitsentscheid der drei Modelle bestimmt werden. Diese sind in folgenden Diagrammen dargestellt (Abbildung 7-27). Durch die verschiedenen Betrachtungen kann die inhärente Unsicherheit der Klassifizierung auch in den berechneten Phasenanteilen ausgedrückt werden. Die Phasenanteile basierend auf dem Mehrheitsentscheid der drei Modelle ist in Tabelle 7-8 dargestellt. Nach Rücksprache mit Experten und Betrachtung der Gefügeaufnahmen erscheinen die bestimmten Phasenanteile wiederum plausibel.

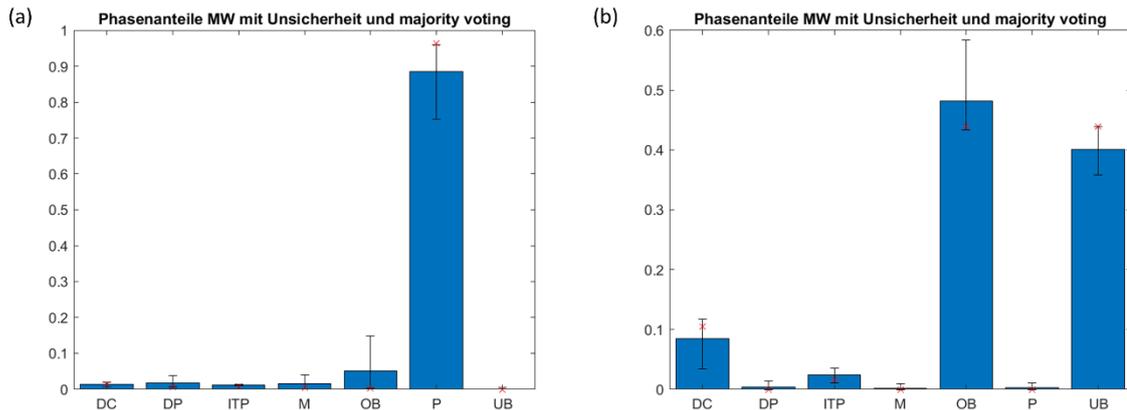


Abbildung 7-27: Anhand der Klassifizierung berechnete Phasenanteile der perlitischen Probe (a) und der bainitischen Probe (b). Der blaue Balken stellt den Mittelwert der drei verwendeten ML-Modelle dar, die Fehlerbalken Minima und Maxima. Der rote Punkt stellt den Phasenanteil basierend auf dem Mehrheitsentscheid dar.

Tabelle 7-8: Phasenanteile der perlitischen und bainitischen Probe, basierend auf dem Mehrheitsentscheid der drei ML-Modelle.

Probe	DC [%]	DP [%]	ITP [%]	M [%]	OB [%]	P [%]	UB [%]
Perlitische Probe	1,4	0,6	0,8	0,4	0	96,8	0
Bainitische Probe	10,5	0	1,7	0	43,9	0	43,9

Zum Abschluss ist eine Quantifizierung der Zweitphase-Objekte pro Klasse möglich, bspw. Größe und Form der Objekte pro Klasse, die Verteilung im Gefüge oder Lamellen- bzw. Lattenabstände in Perlit und Bainit.

Diese separate Quantifizierung pro Objekt ist ein wesentlicher Vorteil der objektweisen ML-Klassifizierung. Eine potenzielle Schwachstelle der objektweisen Betrachtung sind allerdings große Zweitphase Objekte, die mehrere Körner und daher Strukturen mehrerer Klassen enthalten. Diese können dennoch nur als eine Klasse klassifiziert werden. Der in diesem Abschnitt beschriebene probabilistische Ansatz ist in der Lage, dort Abhilfe schaffen. Unter der Annahme, dass diese Objekte durch das Vorhandensein von Strukturen mehrerer Klassen tendenziell „unsicher“ klassifiziert werden, können sie über Filter für den Confidence Index und die Objektgröße erfasst werden. Diese Objekte können anschließend manuell durch einen Experten beurteilt werden, oder sie werden automatisiert in kleinere Objekte unterteilt und erneut klassifiziert. Dies wird im Folgenden an einem Zweitphase Objekt visualisiert, das mit geringem Vertrauen (CI = 0,58) als unterer Bainit klassifiziert wurde, aber auch Strukturen der Klassen ITP und oberer Bainit enthält (Abbildung 7-28). Um eine Aufteilung zu erreichen, die der Form des Zweitphase-Objekts möglichst genau entspricht, und um Ausschnitte zu vermeiden, die nur den schwarzen Hintergrund enthalten, wird eine Superpixel-Zerlegung auf der Grundlage der

MATLAB-Funktion Superpixels durchgeführt [232,233]. Diese Ausschnitte werden in der Folge mit dem bestehenden ML-Modell klassifiziert.

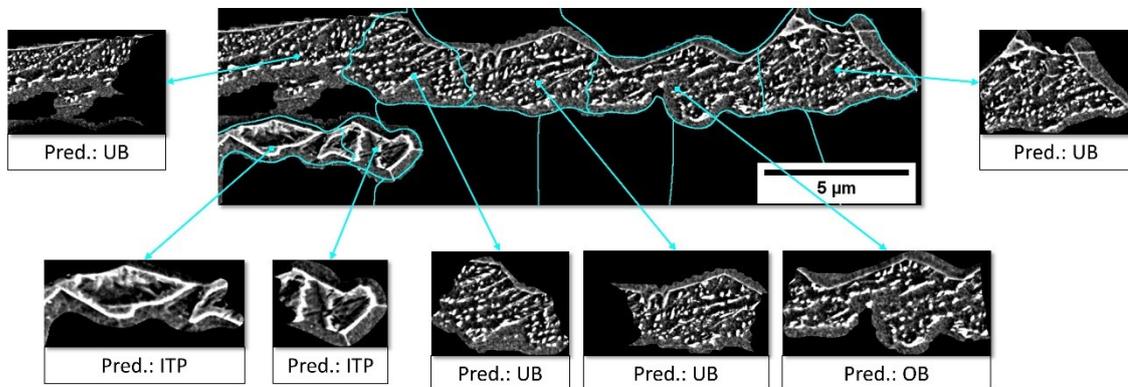


Abbildung 7-28: Großes Zweitphase Objekt, das nach der probabilistischen Klassifizierung als unsichere Vorhersage eingestuft wurde, weil es Strukturen aus mehreren Klassen enthält. Durch die automatische Aufteilung des Bildes in Teilbilder wird eine genauere und differenziertere Klassifizierung erreicht.

Durch die automatische Aufteilung des Bildes in Ausschnitte ist es möglich, eine genauere und differenziertere Klassifizierung zu erreichen: Strukturen aus allen drei vorhandenen Klassen werden erfasst und korrekt vorhergesagt, und anstatt das gesamte Objekt als unteren Bainit zu klassifizieren, kann das Objekt als aus 68 % unterem Bainit, 18 % oberem Bainit und 14 % ITP bestehend quantifiziert werden.

7.6 Zwischenfazit und Ausblick

Die vorgestellte ML-basierte Klassifizierung der C-reichen Zweitphase-Objekte in Zweiphasenstählen bildet die Grundlage einer verbesserten, fortschrittlicheren Gefügeanalyse. Sie ist automatisiert, objektiver, reproduzierbarer und differenzierter als zuvor. Dieses neue Niveau der Gefügeanalyse ist die Voraussetzung zum Aufstellen von Prozess-Gefüge-Eigenschaftskorrelationen, die wiederum für eine kontinuierliche, gefügebasierte Werkstoffoptimierung und -weiterentwicklung benötigt werden. Letztlich bilden ML-Methoden die Grundlage dieser Gefügeanalyse. Die erfolgreiche Implementierung von ML-Methoden kann allerdings nur gewährleistet werden, wenn sie in einem ganzheitlichen Ansatz betrachtet werden. Bei der im vorliegenden Fall betrachteten Bainit-Klassifizierung betrifft der ganzheitliche Ansatz insbesondere die Probenherstellung, die Art der Abbildung und die Zuordnung der Grundwahrheit, und in besonderem Maße auch die Interdependenzen dieser Aspekte. Nur durch die Herstellung und Auswertung von Referenzproben und das Verwenden eines korrelativen Mikroskopieansatzes inklusive EBSD konnte die Grundwahrheit überhaupt erst verlässlich und

objektiv zugeordnet und ein geeignetes ML-Modell trainiert werden. Ein spezielles Augenmerk lag ebenfalls auf der Interpretation der ML-Klassifizierung. Durch Studieren der Fehlklassifizierungen, aber auch durch das Verwenden eines konventionellen ML-Ansatzes mit überwiegend interpretierbaren Merkmalen kann das Klassifizierungsmodell zumindest auf einer oberflächlichen Betrachtungsebene verstanden und auch seine Möglichkeiten und Grenzen besser eingeschätzt werden.

Aufgrund der komplexen Strukturen und Bildungsmechanismen ist die Charakterisierung und Klassifizierung von Bainit ein schwieriges, kontroverses Thema. Es besteht nicht nur Uneinigkeit über den Entstehungsprozess, sondern auch in der Nomenklatur, was sich in der Vielzahl an vorgeschlagenen Klassifizierungsschemata widerspiegelt (2.1.1, 10.1).

Hier kann in Zukunft der in der vorliegenden Arbeit entwickelte korrelative Ansatz zur kombinierten Gefügequantifizierung auf LM-, REM- und EBSD-Ebene zum Einsatz kommen. Dieser kann einerseits dazu verwendet werden, um unter Nutzung der EBSD-Daten mittels unüberwachtem ML bestehende Klasseneinteilungen zu überprüfen oder gar alternative, objektivere Klassen für die Bainit Klassifizierung zu definieren. Andererseits könnte er außerdem zur automatisierten Generierung der Grundwahrheit basierend auf den EBSD-Merkmalen verwendet werden. Generell befindet sich noch viel ungenutztes Potenzial in den EBSD-Daten. Aspekte, die dabei in Zukunft noch detaillierter untersucht werden müssen, sind die Schrittweite der EBSD-Messung und Parameter für das Cleanup der EBSD-Daten. In dieser Arbeit wurde eine vergleichsweise grobe Schrittweite von $0,35\ \mu\text{m}$ gewählt, um mit der vorhandenen EBSD-Kamera in vertretbarer Messzeit einen repräsentativen Gefügebereich erfassen zu können. Obwohl die Gefügestrukturen innerhalb der Zweitphase-Objekte teilweise sehr fein sind, hatte sich diese Schrittweite für die betrachteten Gefüge in bisherigen Arbeiten in der Dillinger Grobblechforschung bewährt. Ein qualitativer Vergleich mit Schrittweiten von $0,15$ und $0,10\ \mu\text{m}$ zeigte in den betrachteten EBSD-Karten (z.B. IQ, KAM, Grenzflächen) außerdem keine signifikant verbesserte Auflösung, die die längere Messzeit rechtfertigen würde. Dennoch ist es denkbar, dass bei zukünftigen EBSD-Messungen durch eine verringerte Schrittweite eine rein EBSD-basierte Unterscheidung verschiedener Bainitarten weiter verbessert werden könnte. Durch immer schnellere EBSD-Kameras wird der Zeitaspekt bei diesen hochauflösten Messungen in der Zukunft auch unkritischer. Gleichzeitig muss jedoch der Rechenaufwand bzw. die benötigte Rechenkapazität für die Verarbeitung der dadurch anfallenden großen Datenmengen bedacht werden. Weiterhin kann in weiteren Untersuchungen auch der Einfluss des Zementits auf die EBSD-Messwerte genauer untersucht werden. Bei der aktuell verwendeten Schrittweite der EBSD-Messung, die im Wesentlichen durch die Aufnahmezeit der EBSD-Kamera und damit der Messzeit pro EBSD-Scan vorgegeben ist, kann dieser nicht zuverlässig als separate Phase

registriert werden. Bezogen auf eine Weiterentwicklung der Auswertemöglichkeiten wäre insbesondere eine objektweise Auswertung der Missorientierungswinkelverteilung, im Sinne eines „bainitischen Fingerabdrucks“ durch die charakteristischen Verläufe für granularen, oberen und unteren Bainit, interessant.

Darüber hinaus könnte durch den korrelativen Ansatz gezielt bestimmt werden, welche Methode für welche Fragestellung bzw. welchen Detailgrad der Auswertung und Klassifizierung ausreichend bzw. notwendig ist. Ein solcher korrelativer Datensatz mit einer kombinierten Gefügequantifizierung auf LM-, REM- und EBSD-Ebene befindet sich aktuell im Aufbau. In Bezug auf eine Gefügeklassifizierung kann anschließend systematisch untersucht werden, welche Klassifizierungsgenauigkeiten mit den unterschiedlichen Methoden (LM, REM, EBSD) erreichbar sind.

Das Potenzial von Referenzproben könnte in zukünftigen Arbeiten weiter ausgebaut werden, indem diese Proben direkt mit Beginn der Datenerzeugung hergestellt werden, und bspw. über eine automatisierte Bildähnlichkeitssuche die klaren, zum Trainieren eines robusten ML-Modells geeigneten Gefügebildaufnahmen aus dem Datensatz herausgesucht werden.

Die objektweise Klassifizierung der C-reichen Zweitphase ist „metallographisch-metallurgisch“ motiviert und geht zurück auf den konventionellen Ansatz des Separierens von Vorder- und Hintergrund und dem anschließenden Auswerten der Vordergrund Objekte, wie es auch in der Standard-Partikelanalyse getan wird. Ein Vorteil dieses Ansatzes ist, dass die zur Klassifizierung verwendeten Parameter anschließend direkt zur Quantifizierung des Objektes (morphologische Parameter der Objekte und deren Substruktur) verwendet werden können. Eine potenzielle Schwachstelle der objektweisen Betrachtung sind allerdings große Zweitphase-Objekte, die mehrere Körner und daher Strukturen mehrerer Klassen enthalten. Diese können dennoch nur als eine Klasse klassifiziert werden. Die in 7.5 beschriebenen Abläufe können dort Abhilfe schaffen. Die benötigte korrelative Charakterisierung mittels LM und REM zum Erhalten der LM-Aufnahme für das Generieren der Maske zur Objektdefinition und -extraktion kann durchaus als zeitkritisch angesehen werden. Durch den vorhandenen großen Datensatz an korrelativen LM und REM-Aufnahmen wird es allerdings möglich sein, ein DL-Modell zur Segmentierung der Zweitphase Objekte direkt aus der REM-Aufnahme zu trainieren. Mit konventionellen Segmentierungsansätzen ist das Segmentieren eines gesamten Zweitphase Objektes in der REM-Aufnahme aufgrund der hohen Auflösung nur schwer möglich, DL ist dazu aber im Stande. Der Ablauf wäre die Bildaufnahme mittels REM, die DL-Segmentierung der C-reichen Zweitphase Objekte in der REM-Aufnahme, und anschließend der reguläre Ablauf zu Objekt- und Merkmalsextraktion sowie Klassifizierung.

8 Machine Learning Segmentierung von Multiphasenstählen

Gegenüber Zweiphasenstahlgefügen ist die Segmentierung und folgende Klassifizierung oder Quantifizierung der Gefüge von Multiphasenstählen deutlich herausfordernder, da eine Trennung der Gefügebestandteile in der LM- oder REM-Aufnahme nicht mehr rein anhand der Grauwertverteilungen möglich ist. Dies betrifft besonders die bainitischen Strukturen, die (in der LM-Aufnahme) aus hellen ferritischen Bestandteilen und dunklen Zweitphase-Bestandteilen zusammengesetzt sind. Eine separate Erfassung der ferritischen Bestandteile und zweiter Phase ließe zwar zu, lattenförmige Zweitphase-Objekte über die Morphologie von granularen zu unterscheiden, eine Erfassung der gesamten Bainitbereiche und damit der absoluten Flächenanteile bspw. des lattenförmigen Bainits wäre damit allerdings nicht möglich. Zur gemeinsamen Erfassung dieser beiden Bestandteile stoßen konventionelle Segmentierungsansätze, wie die Schwellwertsegmentierung, jedoch schnell an ihre Grenzen.

Aktuell finden sich kaum ML-basierte Auswertungen von Multiphasenstahlgefügen. Stattdessen ist eine Charakterisierung mittels EBSD und eine konventionelle Auswertung dieser Daten weit verbreitet (siehe 2.4). Unterscheidungen verschiedener Bainitarten in diesen Gefügen oder eine Segmentierung von polygonalem und bainitischem Ferrit direkt in LM- oder REM-Aufnahmen wurden in der Literatur bisher praktisch nicht berichtet. In einer Vorarbeit [234] wurde ein klassischer Computer Vision Ansatz zur Detektion von lattenförmigem Bainit gegenüber von granularen und polygonalen Bestandteilen erarbeitet. Dabei wandert ein Fenster geeigneter Größe über die Gefügaufnahme und bestimmt mit Hilfe eines Kantendetektionsfilters die Stärke der Richtungsprägung des Gefüges. Darüber werden die lattenförmigen Bereiche erfasst. Über eine Nachbearbeitung aus Nachbarschaftsanalyse und Region Growing ist es möglich, das Ergebnis weiter zu verbessern. Diese Herangehensweise liefert zwar sehr zufriedenstellende Ergebnisse, eine genaue Bestimmung der Bereichsgrenzen des lattenförmigen Bainits oder die Unterscheidung von bainitischem und polygonalem Ferrit ist damit allerdings nicht möglich.

Daher wird der in Kapitel 5 etablierte ganzheitliche Ansatz und die in Kapitel 6 erarbeitete Methodik der korrelativen Charakterisierung nun auf die Charakterisierung von Multiphasenstahlgefügen übertragen. Erste Aufgabe ist die Segmentierung des lattenförmigen Bainits mit Hilfe von DL in LM- und REM-Aufnahmen. Die DL-Segmentierung wird in einem ganzheitlichen Ansatz betrachtet, bei dem Probenkontrastierung, korrelative Bildaufnahme und Annotationen dieselbe Bedeutung wie dem eigentlichen Modelltraining bemessen werden. Durch die Verwendung korrelativer EBSD-Aufnahmen können hochwertige Annotationen erzeugt werden. Vorurteile dem DL gegenüber hinsichtlich Datenmenge und Interpretierbarkeit werden untersucht.

Die zweite Aufgabe ist die ML-basierte Unterscheidung von bainitischem und polygonalem Ferrit ausgehend von EBSD-Daten. Dabei wird ebenfalls untersucht, ob die EBSD-Daten auch eine weitere Unterscheidung des bainitischen Ferrits in lattenförmige und irreguläre Formen ermöglichen. Durch den korrelativen Ansatz kann die EBSD- und ML-basierte Unterscheidung außerdem genutzt werden, um Annotationen zu generieren und die Unterscheidung von bainitischem und polygonalem Ferrit rein anhand von LM-Aufnahmen zu prüfen.

8.1 Datensätze und Grundwahrheiten

Aufgabenstellungen bei der Auswertung der Multiphasenstahlgefüge sind einerseits die DL-basierte Segmentierung des lattenförmigen Bainits in LM- und REM-Aufnahmen, der vom Hintergrund aus polygonalem Ferrit und irregulärem bainitischem Ferrit mit C-reicher Zweitphase unterschieden wird, andererseits eine robuste ML-basierte Unterscheidung von bainitischem und polygonalem Ferrit anhand von EBSD-Daten (siehe Abbildung 4-2). Bei beiden Aufgabenstellungen ist die Zuordnung der Grundwahrheit der entscheidende Schritt. Rein über das visuelle Erscheinungsbild der Gefüge ist dies nicht mehr objektiv und reproduzierbar möglich, daher kommt die korrelative Charakterisierung zum Einsatz, mit dem in Kapitel 6 beschriebenen Ablauf. Eine Unterscheidung der C-reichen Zweitphasen ist hier nicht von Interesse.

Zur Segmentierung des lattenförmigen Bainits wurde sowohl ein LM- als auch ein REM-Datensatz generiert. Zur Untersuchung im LM wurden die Proben mittels 2 %-iger alkoholischer Nital-Lösung geätzt, zur Untersuchung im REM elektrolytisch mit Struers Elektrolyt A2. Die Bildaufnahmen in LM und REM erfolgten wie in 4.6 beschrieben⁶. Alle LM-Aufnahmen wurden vom RGB- ins 8-bit Graustufen-Format umgewandelt. Für beide Datensätze wurde aus Zeitgründen lediglich ein Teil in Form korrelativer Mikroskopie inkl. EBSD aufgenommen. Eine qualitative Auswertung gemäß 6.2 wurde durchgeführt. Geeignete EBSD-Karten wurden exportiert und nach der Registrierung in Überlagerungen mit LM bzw. REM kombiniert. Zum Generieren der pixelweisen Annotationen als DL-Input wurden die Bereiche des lattenförmigen Bainits in diesen Überlagerungen auf einem Wacom Tablet manuell markiert. Geeignete EBSD-Karten sind Darstellungen der Missorientierungen oder der Körner bzw. Korngrenzen. Abbildung 8-1 zeigt eine LM-Aufnahme, die Überlagerung der LM-Aufnahme mit verschiedenen EBSD-Karten sowie die final annotierten Bereiche des lattenförmigen Bainits. Darstellungen der Korngrenzenarten bzw. der einzelnen Körner ermöglichen das Identifizieren der genauen

⁶ REM-Aufnahmen: Zeiss Supra, Inlens-Detektor, 2000-fache Vergrößerung, Auflösung von 2048 x 1536 px mit einer Pixelgröße von 27,8 nm.

Objektgrenzen der lattenförmigen Bereiche. Dies ist besonders hilfreich, falls Korngrenzen in der LM-Aufnahme aufgrund schwacher Kontrastierung nicht oder nur schwach erkennbar sind. Missorientierungsparameter helfen, bainitischen und polygonalen Ferrit zu trennen. So können angrenzende oder in den bainitischen Bereichen liegende Ferritkörner erkannt und von der Annotation ausgeschlossen werden. Eine Unterscheidung zwischen lattenförmigem und irregulärem bainitischem Ferrit bleibt zwar auch mit den vorhandenen EBSD-Information herausfordernd, insbesondere wenn die Formen nicht klar lattenförmig oder klar irregulär sind und sich stattdessen in einem Übergangsbereich zwischen diesen Erscheinungsformen befinden. Dennoch kann mit Hilfe der Missorientierungen und der Betrachtung der Korngrenzenarten eine verbesserte Unterscheidung erreicht werden.

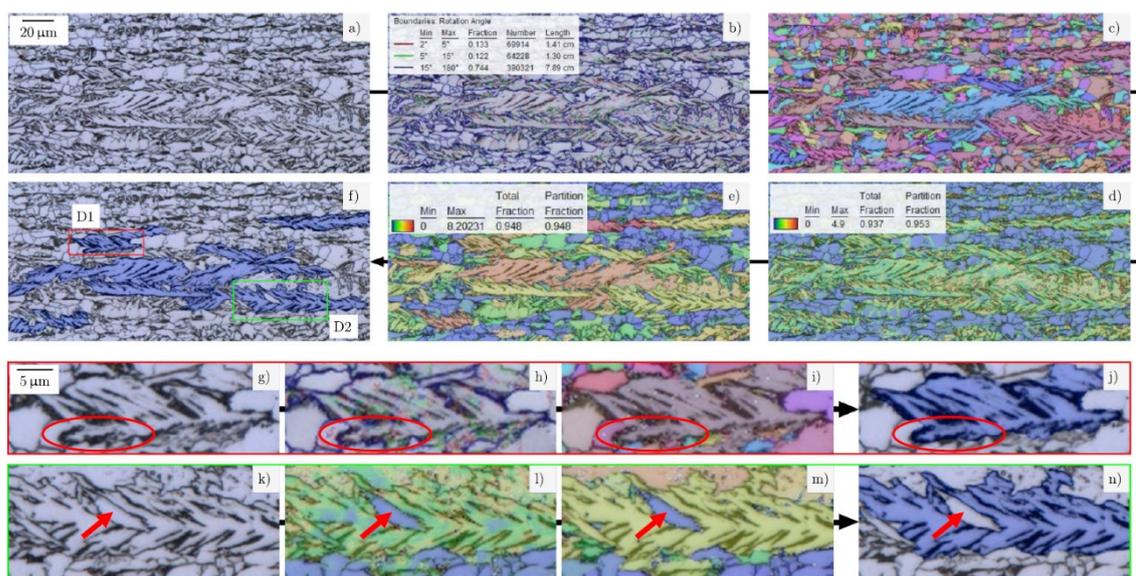


Abbildung 8-1: Visualisierung des Annotationsprozesses mit Hilfe korrelativer EBSD-Aufnahmen. (a) LM-Aufnahme. (b)-(e) Überlagerung der LM-Aufnahme mit EBSD Grenzflächen-Karte, UGC-Karte, KAM-Karte und GOS-Karte. (f) annotierte Bereiche lattenförmigen Bainits basierend auf EBSD-Karten. (g)-(j) Detail D1 zeigt, wie über Korn- und Korngrenzendarstellungen unklare Objektgrenzen klar erfasst werden können. (k)-(n) Detail D2 zeigt, wie polygonale Ferrit Körner entlang oder innerhalb der Bainit Bereiche mit Hilfe von Missorientierungsparametern identifiziert werden können, nach [207].

Aus Zeit- oder Kostengründen ist es nicht immer möglich, alle Annotationen für die vergleichsweise große Bildmenge, die für die DL benötigt wird, durch korrelative EBSD-Messungen zu erhalten. Daher wurden korrelative EBSD-Messungen lediglich für eine Teilmenge von Bildern durchgeführt, und die durch den Experten aus den kombinierten Daten gewonnenen Erkenntnisse und Erfahrungen wurden auf reguläre LM- und REM-Aufnahmen übertragen. Die korrelativen Messungen können also als Referenz für den gesamten Datensatz angesehen werden. Daher sind fundierte und objektivere Annotationen durch menschliche Experten anschließend auch ohne die EBSD-Daten möglich.

Die finalen, annotierten Datensätze sind in Tabelle 8-1 zusammengefasst. Aufgrund der unterschiedlichen Vergrößerungen bei LM- und REM-Aufnahmen hat der lattenförmige Bainit pro Bild unterschiedlich große Anteile (durchschnittlich 28 % für LM und 60 % für REM-Aufnahmen⁷).

Tabelle 8-1: Kenngrößen der annotierten Datensätze.

	LM-Bildsatz	REM-Bildsatz
Anzahl Gefügeaufnahmen	51	36
Vergrößerung	1000-fach	2000-fach
Bildgröße	1024 x 1024 px	2048 x 1433 px
Anteil lattenförmiger Bainit	28 %	60 %

Grundlage für die Unterscheidung von bainitischem Ferrit (BF) und polygonalem Ferrit (PF) bildet erneut die korrelative Charakterisierung bestehend aus LM und EBSD. Es wurde geeignetes Probenmaterial ausgewählt, das sowohl eine repräsentative Bandbreite der vorliegenden Multiphasen-Stahlgefüge abdeckt als auch eindeutig zuordenbare BF- und PF-Referenzbereiche enthält. Zur Untersuchung im LM wurden die Proben mittels 2 %-iger alkoholischer Nital-Lösung geätzt.

Tabelle 8-2: Für den Datensatz zur BF/PF Unterscheidung verwendete Proben und deren Gefüge.

Probe	Gefüge
148	Voll-bainitisch
01543	Voll-ferritische Referenzbereiche
1053	Ferrit + Bainit
M890 P1	Ferrit + Bainit
M890 P3	Ferrit + Bainit
1102	Bainit + Ferrit

Die Unterscheidung von BF und PF erfolgte zuerst rein über die quantifizierten EBSD-Daten. Grundwahrheiten sind durch voll-ferritische und voll-bainitische Referenzproben bzw. Referenzbereiche gegeben. Aus den generierten Daten wurde dafür ein ML-Modell trainiert. Die LM- bzw. REM-Aufnahmen dienten zunächst einer genauen Vorgabe der Referenzbereiche für die Grundwahrheit. Außerdem wurden sie zur besseren Visualisierung und damit zur Beurteilung

⁷ Die verschiedenen Anteile an lattenförmigem Bainit sind in erster Linie ein Effekt der unterschiedlichen Vergrößerungen in LM und REM.

der Klassifizierungsergebnisse benötigt. Weiterhin ist später eine Prüfung möglich, welche Genauigkeiten über eine reine LM-Auswertung erreichbar sind.

8.2 Segmentierung des lattenförmigen Bainits mittels Deep Learning

Der Großteil der Ausführungen zur Segmentierung des lattenförmigen Bainits wurde bereits im Journal Nature Communications veröffentlicht [207]. Die Studie erfolgte in einer Kooperation mit dem Fraunhofer Institut für Werkstoffmechanik in Freiburg (IWM) und dem Department of Materials Science and Engineering der Carnegie Mellon University (CMU) in Pittsburgh, USA. Der Lehrstuhl für Funktionswerkstoffe definierte die Aufgabenstellung, koordinierte das Projekt, generierte die Datensätze und Grundwahrheiten. Die Datenvorbereitung für das DL sowie das Training der DL-Modelle fand in Absprache mit dem Lehrstuhl für Funktionswerkstoffe an IWM und CMU statt. Die Ergebnisse wurden gemeinsam interpretiert und diskutiert.

8.2.1 Deep Learning Methodik

8.2.1.1 Datenvorbereitung

Da die Auflösung der originalen Gefügaufnahmen zu groß für das Anwenden von DL ist, wurden die Gefügaufnahmen und korrespondierenden Annotationsmasken in kleinere Bildausschnitte zerlegt (engl. tiling). Bildausschnitte der LM-Aufnahmen haben eine Auflösung von 256 x 256 px, die der REM-Aufnahmen 512 x 512 px. Damit die Kernel der Convolutional Layer des CNN den gesamten Bildausschnitt erfassen können, wird ein sog. mirror-padding angewandt (LM auf 380 x 380 px, REM auf 636 x 636 px). Zur Analyse des Einflusses des „Bildkontexts“ wurde vor dem Zerlegen in Bildausschnitte optional ein Runterskalieren (engl. down-scaling) der Bilder auf den Faktor 0,5 in beiden Bilddimensionen durchgeführt. Der Einfluss des down-scaling ist in Abbildung 8-2 dargestellt. Im Vergleich zum regulären tiling ist der Bildkontext durch ein weiteres „Blickfeld“ größer, dafür können aber weniger Bildausschnitte generiert werden.

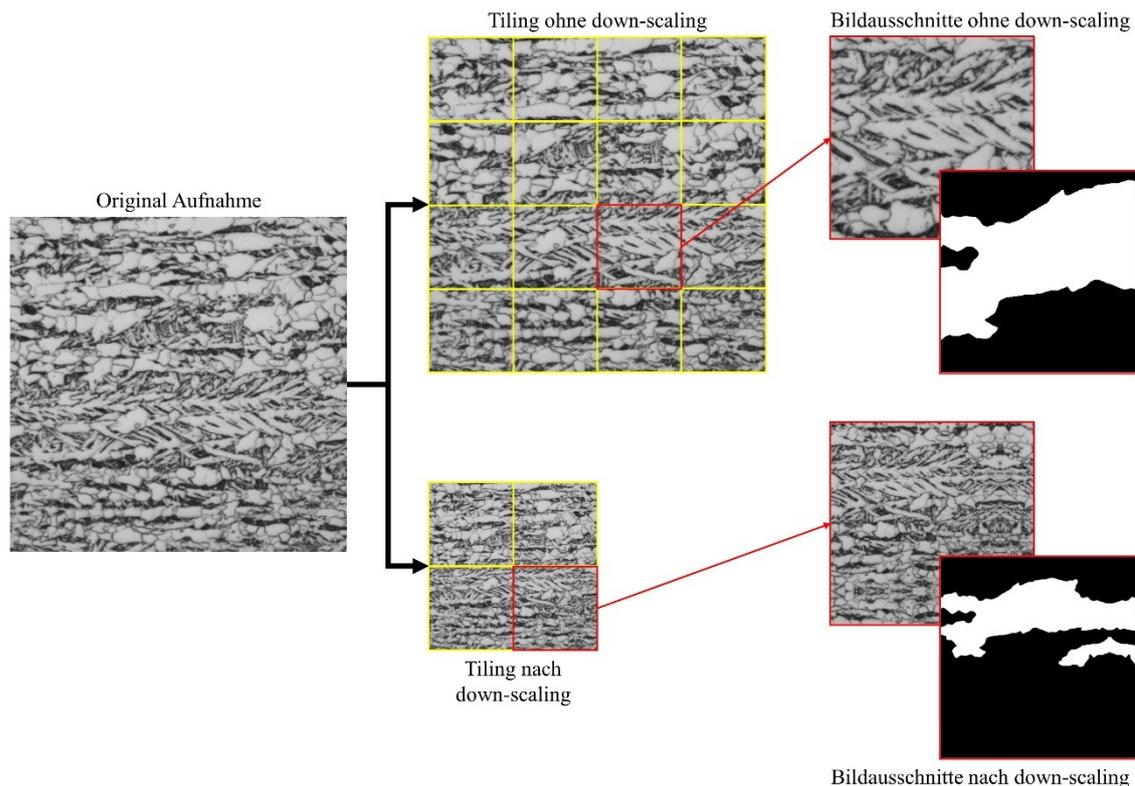


Abbildung 8-2: Veranschaulichung des Einflusses des down-scaling auf Anzahl und Kontext der generierten Bildausschnitte. Im Vergleich zum direkten tiling werden aufgrund des down-scaling weniger Bildausschnitte erzeugt (4 vs. 16), die dafür aber mehr Bild-Kontext im Sinne eines größeren Betrachtungsbereich enthalten.

Letztlich ergaben sich vier Datensätze zum Trainieren eines DL-Segmentierungsmodells (Tabelle 8-3). Zur Modell-Validierung wurde eine 5-fache Kreuzvalidierung angewandt.

Tabelle 8-3: Finale vier Datensätze nach Datenvorbereitung.

Datensatz	1	2	3	4
Bildaufnahme	LM	LM	REM	REM
Down-scaling	Nein	Ja	Nein	Ja
Auflösung [px]	380 x 380	380 x 380	636 x 636	636 x 636
Anzahl Bildausschnitte	754	179	413	135

8.2.1.2 Modell-Training

Zur eigentlichen DL-Segmentierung wurden die „Best Practices“ zweier Arbeitsgruppen angewandt, zur Verfügung gestellt von IWM und CMU. Beide Ansätze basieren auf der U-Net Architektur, weisen jedoch dennoch einige Unterschiede auf, die im Folgenden beschrieben werden. Ein Vergleich der Ergebnisse erlaubt Rückschlüsse auf die generelle Anwendbarkeit und Robustheit U-Net basierter Gefügesegmentierungen.

Beim ersten Ansatz wurde ein sog. „Vanilla“ U-Net verwendet, das nicht vortrainiert wurde, sondern zufällig initialisiert ist. Eine „Focal Loss“ Funktion und ein Adam Optimizer wurden verwendet. Das Training erfolgte für 250 Epochen. Beim zweiten Ansatz wurde ein U-Net mit VGG16 „Backbone“ verwendet. Die anfänglichen fünf Faltungsblöcke des VGG16 stellen die vier Encoder Ebenen und die mittlere Ebene des U-Nets dar. Der VGG16 Encoder wurde auf ImageNet vortrainiert. Eine „Cross-entropy Loss“ Funktion und ein Adam Optimizer wurden verwendet. Das Training erfolgte für 150-250 Epochen. Schematische Darstellungen beider Architekturen finden sich im Anhang (10.10). Relevante Unterschiede zwischen beiden Ansätzen sind in Tabelle 8-4 aufgeführt.

Tabelle 8-4: Unterschiede zwischen Vanilla U-Net und VGG16 U-Net.

	Vanilla U-Net	U-Net VGG16
Data Augmentation	Affine Transformationen Elastische Transformationen Optische Verzerrungen Gaussian und motion blurring (nur REM-Datensatz)	Affine Transformationen Elastische Transformationen Grid Verzerrungen Gaussian und motion blurring Gaussian Noise Helligkeit und Kontrast
Netzwerk Initialisierung	Zufällige Initialisierung	Vortrainiert auf ImageNet
Upsampling approach	Transponierte Convolutions, die die Kanalanzahl halbieren	Bilineare Interpolation unter Beibehaltung der Kanalanzahl
Convolution approach encoder	2 Convolution Layer in jedem Level	3 Convolution Layer in späten Encoder und Center Level
Batch Normalisierung	Im Encoder und Decoder	Nur im Decoder

8.2.2 Ergebnisse und Diskussion

8.2.2.1 Deep Learning Segmentierung

Zur Evaluierung der Segmentierungsergebnisse ist die Pixel-Genauigkeit nur bedingt geeignet, da insbesondere die LM-Aufnahmen unausgewogene Klassen aufweisen. Stattdessen wurde die Intersection over Union (IoU) verwendet. Sie wurde für jeden der fünf Validierungssätze der Kreuzvalidierung ermittelt. Von diesen fünf Werten wurden Mittelwert und Standardabweichung gebildet. Zusätzlich wurde eine ungesehene, gesamte Gefügeaufnahme segmentiert und evaluiert. Tabelle 8-5 zeigt die IoU verschiedener Modelle für die LM-Aufnahmen, die anhand der unterschiedlichen Datensätze und DL-Ansätze trainiert wurden.

Tabelle 8-5: IoU für verschiedene U-Net basierte Modelle zur Segmentierung der LM-Aufnahmen.

Nr.	Modell	Modell Initialisierung	Daten-satz	Down-scaling	IoU Hintergrund [%]	IoU lattenförmiger Bainit [%]
1	Vanilla U-Net	Zufällig	1	-	87,0 ± 1,5	70,2 ± 1,2
2	Vanilla U-Net	Zufällig	2	0,5 x 0,5	87,2 ± 1,9	69,5 ± 1,8
3	U-Net VGG16	Vortrainiert auf ImageNet	1	-	87,6 ± 0,9	71,3 ± 1,7
4	U-Net VGG16	Zufällig	1	-	86,3 ± 1,3	69,3 ± 1,5
5	U-Net VGG16	Vortrainiert auf ImageNet	2	0,5 x 0,5	87,1 ± 1,7	71,6 ± 1,7

Alle Modelle erreichen vergleichbare Pixel-Genauigkeiten um 90 % und ähnliche IoU Werte. Es können keine signifikanten Unterschiede festgestellt werden. Für eine zufällige Netzwerk Initiierung (nicht vortrainiert auf ImageNet) erreicht das konventionelle U-Net leicht bessere Werte als das VGG16 U-Net (Modell 1 vs. Modell 4). Ein Vortrainieren auf ImageNet resultiert in einer leicht verbesserten IoU (Modell 3 vs. Modell 4). Das down-scaling hat praktisch keinen Einfluss auf die IoU (Modell 1 vs. Modell 2, und Modell 3 vs. Modell 5). Letztlich sind Modelle 3 und 5, also die auf ImageNet vortrainierten VGG16 U-Net Modelle, geringfügig am besten. Tabelle 8-6 zeigt die IoU verschiedener Modelle für die REM-Aufnahmen, die anhand der unterschiedlichen Datensätze und DL-Ansätze trainiert wurden.

Tabelle 8-6: IoU für verschiedene U-Net basierte Modelle zur Segmentierung der REM-Aufnahmen.

Nr.	Modell	Modell Initialisierung	Daten-satz	Down-scaling	IoU Hintergrund [%]	IoU lattenförmiger Bainit [%]
6	Vanilla U-Net	Random	3	-	69,2 ± 2,1	77,5 ± 2,4
7	Vanilla U-Net	Random	4	0,5 x 0,5	75,4 ± 2,9	77,9 ± 3,3
8	U-Net VGG16	Vortrainiert auf ImageNet	3	-	71,0 ± 2,5	80,1 ± 2,4
9	U-Net VGG16	Vortrainiert auf ImageNet	4	0,5 x 0,5	77,7 ± 3,2	80,4 ± 2,6
10	U-Net VGG16	Random	4	0,5 x 0,5	68,4 ± 4,0	73,1 ± 1,5

Für eine zufällige Netzwerk Initiierung erreicht das konventionelle U-Net bessere Werte als das VGG16 U-Net (Modell 7 vs. Modell 10). Das Vortrainieren auf ImageNet resultiert im Vergleich zu den LM-Aufnahmen in einer signifikanten Verbesserung (Modell 9 vs. Modell 10, +9 % Hintergrund, +7 % lattenförmiger Bainit). Auch das down-scaling hat hier eine Verbesserung der IoU zur Folge (Modell 6 vs. Modell 7, und Modell 8 vs. Modell 9). Letztlich erreicht Modell 9, das auf ImageNet vortrainierte VGG16 U-Net mit downscaling vor dem tiling, die besten Werte. Die IoU Werte entsprechen einer Pixel-Genauigkeit von etwa 88 %.

Zusätzlich zu der innerhalb der Kreuzvalidierung an den Bildausschnitten bestimmten IoU wurden ungesehene, gesamte Gefügeaufnahmen mit den unterschiedlichen Modellen segmentiert und evaluiert. Abbildung 8-3 zeigt Segmentierungen einer LM- und REM-Aufnahme der besten

Vanilla U-Net Modelle (Modelle 1 und 7), der besten zufällig initialisierten VGG U-Net Modelle (Modelle 4, 10) sowie der besten auf ImageNet vortrainierten VGG U-Net Modelle (Modelle 3, 9). Letztere sind die jeweils besten Modelle für LM- und REM-Aufnahmen.

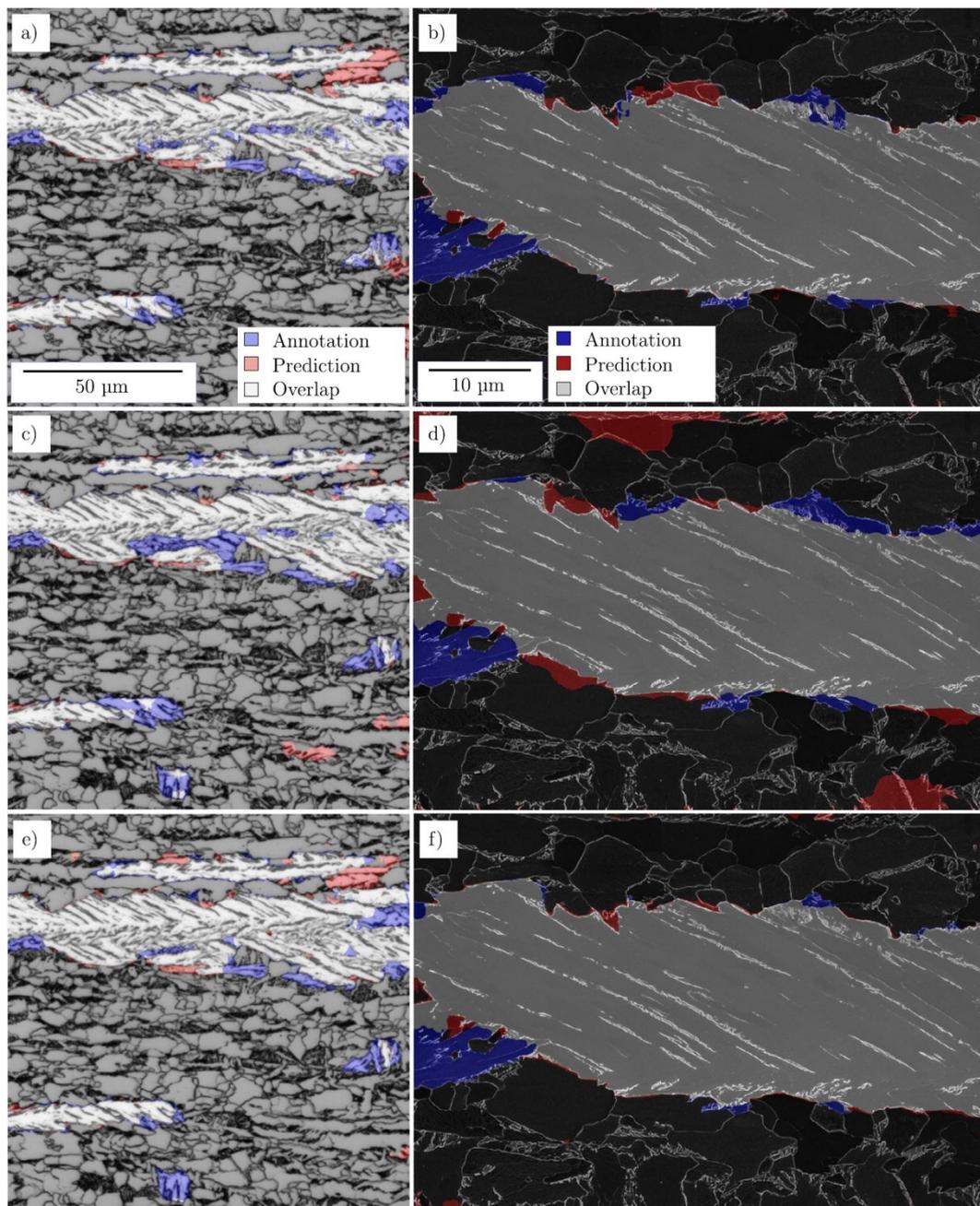


Abbildung 8-3: LM- und REM-Aufnahmen überlagert mit der Segmentierung des lattenförmigen Bainits für verschiedene Modelle. a) und b) die besten zufällig initialisierten Vanilla U-Nets (Modelle 1,7). c) und d) die besten zufällig initialisierten VGG16 U-Nets (Modelle 4, 10). e) und f) die besten auf ImageNet vortrainierten VGG16 U-Nets (Modelle 3, 9), nach [207].

Der Großteil der lattenförmigen Bainitbereiche wurde korrekt identifiziert, und die Segmentierungen der drei betrachteten Modelle pro jeweiliger Aufnahmetechnik stimmen weitestgehend überein. Auch die fehlerhaften Vorhersagen in den Modellen decken sich überwiegend. Nicht erkannte Bereiche des lattenförmigen Bainits betreffen im Wesentlichen kleinere Objekte ohne übermäßig stark ausgeprägte Lattenstruktur sowie die Ränder größerer Bainitbereiche mit prägnanter Lattenstruktur. Falsch als lattenförmigen Bainit segmentierte Bereiche sind i.d.R. kleinere Bereiche, in denen Karbide oder Korngrenzen lattenähnliche Formen aufweisen. Insgesamt treten die Fehler in den Modellen an den Stelle auf, an denen auch Experten während einer manuellen Segmentierung Fehler begehen könnten, oder sich mehrere Experten, auch mit korrelativen Daten, uneinig wären. Bei beiden Aufnahmetechniken, aber insbesondere bei der REM-Aufnahme, liefert das zufällig initiierte VGG16 U-Net die schlechteste Segmentierung.

Grundsätzlich ist für beide Aufnahmetechniken, LM und REM, was in diesem Fall verschiedene Vergrößerungen und Auflösungen bedeutet, eine verlässliche Segmentierung des lattenförmigen Bainits möglich. Die letztliche Wahl der Aufnahmetechnik ist bestimmt durch den Anwendungszweck. Lichtmikroskop ist einfacher, schneller und kann große Bereiche erfassen, während REM-Aufnahmen durch die höhere Auflösung eine bessere Auswertung der C-reichen Zweitphase ermöglichen, falls dies, zusätzlich zur Segmentierung der lattenförmigen Bereiche, von Relevanz wäre.

Sowohl zufällig initialisierte Netzwerke als auch vortrainierte Netzwerke konnten mit vergleichsweise kleinen Datensätzen der Größenordnung 30-50 Gefügebildaufnahmen sowohl für LM- als auch für REM-Aufnahmen erfolgreich trainiert werden. Beim LM-Datensatz hatte das Vortrainieren auf ImageNet lediglich einen geringen Einfluss (ca. 2 % IoU), da die Datenmenge groß genug ist und jede Aufnahme ein vergleichsweise großes Blickfeld erfasst (754 Bildausschnitte im Datensatz ohne down-scaling, 179 Bildausschnitte im Datensatz mit down-scaling). Beim REM-Datensatz hatte das Vortrainieren auf ImageNet allerdings eine signifikante Verbesserung zur Folge (+9 % Hintergrund, +7 % lattenförmiger Bainit). Dies ist auf die im Vergleich zum LM-Datensatz geringere Datenmenge (413 Bildausschnitte im Datensatz ohne down-scaling, 135 Bildausschnitte im Datensatz mit down-scaling), aber auch auf die höhere Vergrößerung der REM-Aufnahmen, gleichbedeutend mit einem kleineren Sichtfeld auf den lattenförmigen Bainit, zurückzuführen. Umfasst ein Datensatz nur wenige Bilder mit einem kleinen Sichtfeld, empfiehlt sich daher ein Vortrainieren mit den typischen zur Verfügung stehenden Datensätzen (ImageNet).

Durch die ganzheitliche Betrachtung einer DL-basierten Segmentierung, inklusive Berücksichtigung aller Schritte, die zur Gefügebildaufnahme und dem Erscheinungsbild des Gefüges

führen, konnten möglichst konstante Rahmenbedingungen bei Probenpräparation, -kontrastierung und Bildaufnahme definiert und dadurch die Varianz reduziert werden, sodass auch mit wenigen Gefügebildern erfolgreiche DL-Segmentierungsmodelle trainiert werden konnten. Dies entkräftet das häufig genannte Vorurteil, dass DL große Datenmengen benötigt. Verglichen mit Bildern natürlicher Szenarien, die maßgebend für die Entwicklung und das Benchmarking von DL-Ansätzen sind, haben Gefügebildern i.d.R. mehrere ROI im Bild und werden unter einer konstanten Blickrichtung (Probenorientierung im Mikroskop) aufgenommen. Daher liegt der Schluss nahe, dass Gefügebildern informationsreichere Bilder mit weniger äußeren Freiheitsgraden darstellen, und dementsprechend auch vermeintlich kleine Datenmenge für DL-Modelle ausreichen.

Zur Segmentierung wurden DL-Ansätze zweier Arbeitsgruppen angewandt, die beide auf der U-Net Architektur basieren, dennoch Unterschiede aufweisen. Die ähnlichen Segmentierungsergebnisse der U-Net-basierten Modelle deuten auf eine allgemeine Leistungsrobustheit in Bezug auf verschiedene Architekturen und Trainingsstrategien hin. Insbesondere wurden keine gravierenden Unterschiede durch verschiedene Netzwerk Initialisierungen (zufällige Initialisierung vs. ImageNet vortrainiert, bei ausreichend Trainingsdaten), Padding- oder Normalisierungsstrategien beobachtet.

Ein Einfluss des down-scalings konnte bei den LM-Aufnahmen nicht festgestellt werden. Dies ist darauf zurückzuführen, dass im Lichtmikroskop wegen geringer Vergrößerung bzw. Auflösung repräsentative Gefügebereiche erfasst werden und kein zusätzlicher Kontext in Form eines weiteren Blickfeldes benötigt wird. Bei der Segmentierung der REM-Aufnahmen hatte das down-scaling allerdings einen positiven Einfluss. Aufgrund der höheren Vergrößerung bzw. Auflösung enthalten die REM-Bildausschnitte tendenziell nur kleine Teile der lattenförmigen Bereiche und des Hintergrunds, sodass eine Verbesserung durch Berücksichtigung des größeren Bildkontextes durch das down-scaling plausibel erscheint. In erster Linie wurde die IoU des Hintergrunds verbessert. Dies liegt daran, dass bei der Bildaufnahme der lattenförmige Bainit von Interesse war und die Aufnahmen daher tendenziell mehr lattenförmigen Bainit enthalten, der typischerweise zentral in der Aufnahme liegt. Durch den vergrößerten Kontext sowie das mirror-padding der Ränder nach dem tiling wurde dadurch eher die Erkennung des Hintergrunds begünstigt.

Letztlich haben die diskutierten Aspekte einen vergleichsweise geringen Einfluss auf die Genauigkeit, da für die verschiedenen Varianten ähnliche Werte erreicht werden. Nun ist es allerdings wichtig, sich nicht nur auf die für ML typischen Performance Metriken zu beschränken, sondern auch die Genauigkeit in Bezug auf die bestimmten Phasenanteile zu evaluieren. Die IoU Werte der Modelle für den lattenförmigen Bainit entsprechen lediglich Abweichungen in der

Größenordnung 1-2 % bezogen auf den Phasenanteil. Diese Abweichung ist geringer als die Varianz in den Phasenanteilen bei der manuellen Segmentierung durch mehrere Experten oder sogar der wiederholten manuellen Segmentierung durch denselben Experten und stellt damit ein bemerkenswertes Ergebnis dar. Da bei der Segmentierung entlang der Objektgrenzen einige Abweichungen auftraten, ist die Lokalisierung von Phasengrenzen und die Berechnung morphologischer Parameter dieser Objekte nur in begrenztem Umfang möglich. Diese Randabweichungen sind möglicherweise auf die verbleibende Ungenauigkeit beim manuellen Annotieren dieser Bereiche auf dem Tablet zurückzuführen. Andererseits ermöglicht die Segmentierung überhaupt erst die getrennte Quantifizierung der verschiedenen Gefügebereiche. Im vorliegenden Fall können bspw. die Art der Zweitphase oder Charakteristika der Bainitlatten (z. B. Lattenbreite) für die jeweiligen Bereiche getrennt bestimmt werden, anstatt diese Charakteristika für das gesamte Bild zu berechnen, was eine differenziertere und fortgeschrittenere Gefügequantifizierung ermöglicht. Solche zielgerichteten Gefügeanalysen sind wiederum die Voraussetzung zum Aufstellen von Prozess-Gefüge-Eigenschafts-Korrelationen als Grundlage einer kontinuierlichen Werkstoffoptimierung.

8.2.2.2 Visualisierung und Interpretation des CNN-Entscheidungsprozess

Um den Entscheidungsprozess des CNN nachzuvollziehen, wurden die Visualisierungsmethoden „Network Dissection“ [235] und „Gradient Weighted Class Activation Maps“ (Grad-CAM) [236] am IWM angewendet. Die Auswertungen erfolgten an einer LM-Aufnahme anhand der Modelle 1 und 3 (Vanilla bzw. VGG16 U-Net mit den jeweils besten IoU Werten). Obwohl die folgenden Ausführungen lediglich qualitativer Natur sind, sind sie sehr hilfreich für den Versuch, den Netzwerk-Entscheidungsprozess zu interpretieren.

Den Hintergrund in der LM-Segmentierung betreffend, wurden mittels Grad-CAM starke Aktivierungen bis zu einem gewissen Grad durch Partikel der kohlenstoffreichen zweiten Phase (Abbildung 8-4b, c, e, h), aber zum größten Teil durch Körner und Korngrenzen des polygonalen Ferrits (Abbildung 8-4b, d, f, g, i) verursacht. Darüber hinaus liegt in der Schicht `down4convr1` (Abbildung 8-4c) der Schwerpunkt auf aufeinandertreffenden Korngrenzen wie Tripel- und Vierfachpunkten, die diskriminierende Merkmale darstellen. Die Aktivierungen im Vanilla U-Net und im VGG16 U-Net stimmen größtenteils überein (Abbildung 8-4e und h zeigen ähnliche Aktivierungen, die sich in der Skalierung unterscheiden). Zum Ende des Decoders hin (Layer `up4convr2`), fokussiert sich das Vanilla U-Net allerdings auf die Korngrenzen des polygonalen Ferrits (Abbildung 8-4f), während sich das VGG16 U-Net auf die Körner konzentriert (Abbildung 8-4i). Aktivierungen durch den lattenförmigen Bainit wurden in einigen Schichten durch Partikel

der zweiten Phase und Korngrenzen im Allgemeinen oder durch langgestreckte Partikel der zweiten Phase und Korngrenzen ausgelöst.

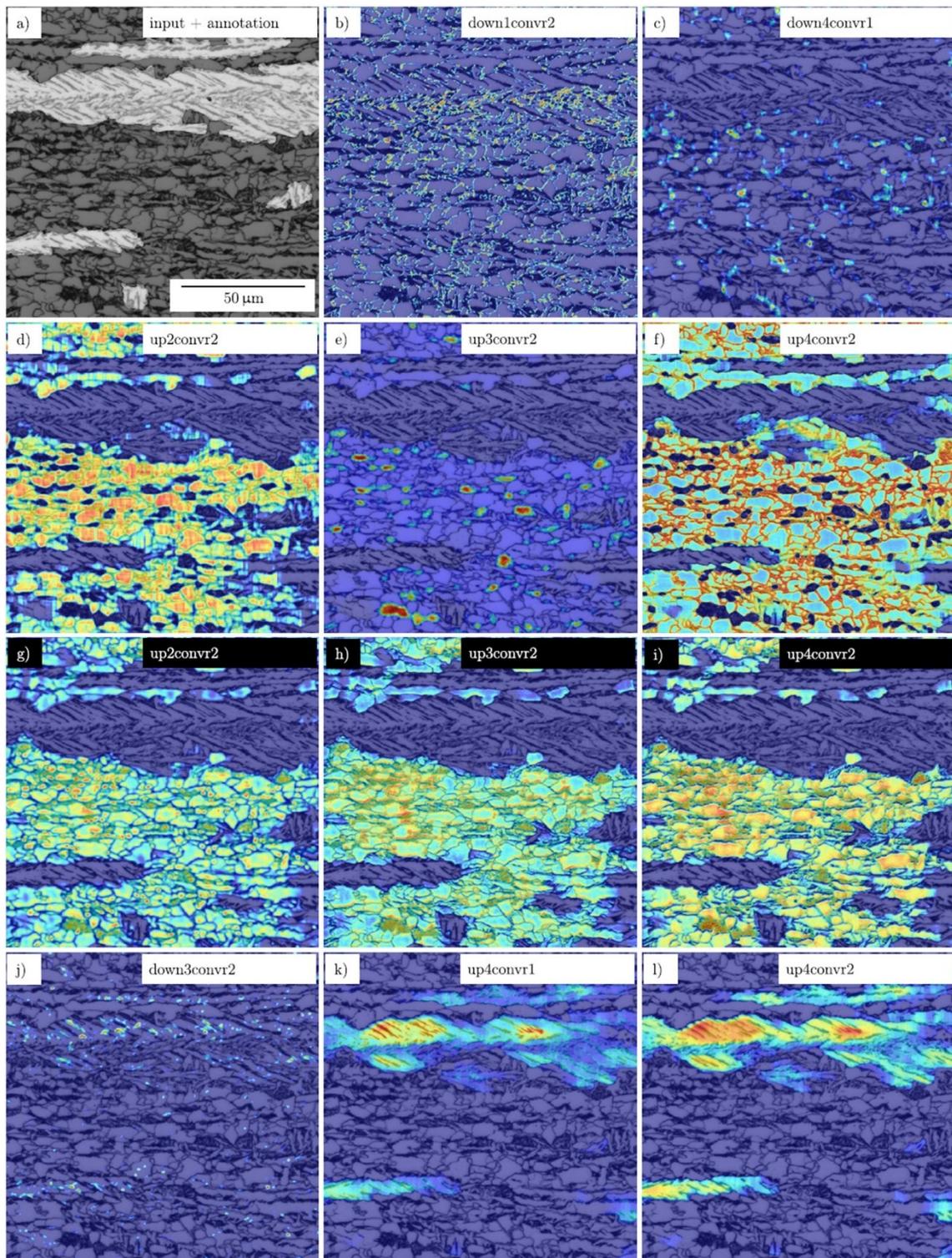


Abbildung 8-4: Grad-CAM Aktivierungs-Karten zur Visualisierung des Netzwerk-Entscheidungsfindungsprozesses. (a) LM-Aufnahme mit überlagelter Annotation. (b)-(i) Relevante Bereiche zur Erkennung des Hintergrunds. (j)-(l) Relevante Bereiche zur Erkennung des lattenförmigen Bainit. Weiße Beschriftung = Modell 1 (Vanilla U-Net), schwarze Beschriftung = Modell 3 (VGG16 U-Net). Modifiziert nach [207].

Die stärksten Reaktionen wurden jedoch durch ausgeprägte, umfangreichere Lattenbereiche verursacht. Signifikante Unterschiede zwischen den verschiedenen U-Net Ansätzen wurden nicht festgestellt. Mittels Network Dissection zeigten sich Partikel der zweiten Phase sowie längliche Korngrenzen (Abbildung 8-5a), lattenförmige Partikel der zweiten Phase (Abbildung 8-5b) und der Bereich größerer Körner (Abbildung 8-5c) als relevante Merkmale.

Insgesamt kann der Entscheidungsprozess des Netzwerks mit der Herangehensweise des menschlichen Experten zur Beurteilung und Interpretation der Aufnahmen korreliert werden. So wird die Entscheidung für den Hintergrund vor allem von der Existenz der weitestgehend polygonalen Ferritkörnern abhängen. Auch bei den Bereichen des lattenförmigen Bainits ist eine Analogie festzustellen, da die ausgeprägten, großen Lattenbereiche auch vom menschlichen Auge aufgrund der gleichmäßigen Lattenstruktur im Vergleich zur Umgebung stark wahrgenommen werden sollten.

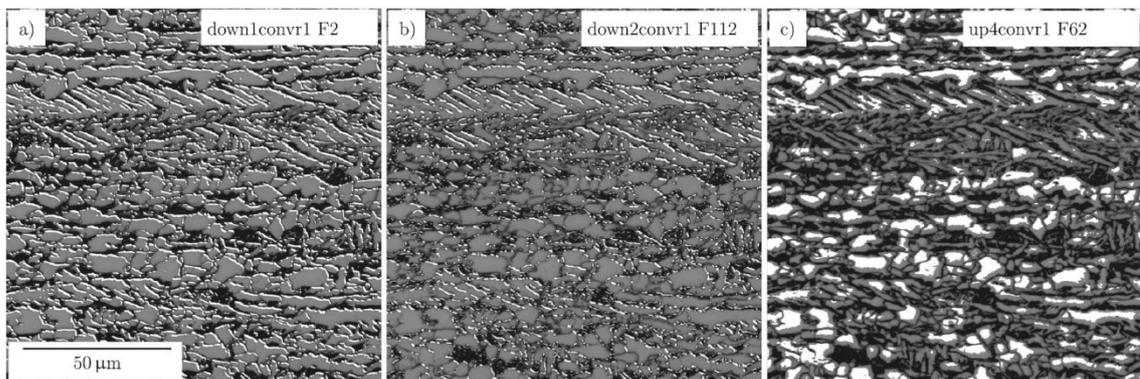


Abbildung 8-5: Network Dissection Auswertung zur Visualisierung des Netzwerk-Entscheidungsfindungsprozesses. Modifiziert nach [207].

8.2.3 Zwischenfazit

Die DL-Segmentierung wurde in einem ganzheitlichen Ansatz betrachtet, bei dem Probenpräparation, Probenkontrastierung, Bildaufnahme und Annotationen die gleiche Bedeutung bemessen wurden wie der eigentlichen DL-Segmentierung. Durch hohe Qualität und Reproduzierbarkeit bei den Schritten Probenpräparation, Probenkontrastierung und Bildaufnahme konnten Gefügaufnahmen mit einer geringen Varianz aufgenommen werden, die es ermöglichten, sehr gute Segmentierungsmodelle mit vergleichsweise wenig Daten zu trainieren. Dementsprechend ist diese DL-Segmentierung sehr interessant für wiederkehrende Analysen, bspw. in der Qualitätskontrolle, in der Werkstoff und Probenkontrastierung i.d.R. gleichbleibend sind und ebenfalls eine geringe Varianz erwartet wird. Die Anwendung korrelativer Mikroskopie inkl. EBSD ermöglichte hochwertige und objektive EBSD-basierte Annotationen. Die ähnlichen Segmentierungsergebnisse der unterschiedlichen, U-Net-basierten

Modelle zeigen eine allgemeine Leistungsrobustheit in Bezug auf verschiedene Architekturen und Trainingsstrategien. Mittels geeigneter Visualisierungsmethoden konnten darüber hinaus Analogien zwischen dem Netzwerk-Entscheidungsprozess und der Beurteilung durch einen menschlichen Betrachter aufgezeigt werden. Letztlich konnten bei diesem betrachteten Fall zwei oft genannte Vorurteile gegenüber DL, das Benötigen großer Datenmenge und die vermeintlich schlechte Interpretierbarkeit und Intransparenz, entkräftet werden.

8.2.4 Ausblick

Die korrelativen EBSD-Aufnahmen und deren qualitative Auswertung stellten die Grundlage für die hochwertigen, objektiven Annotationen dar. Letztlich erfolgte das Annotieren jedoch manuell an einem Tablet, was mühsam und zeitaufwendig ist. Die korrelativen EBSD-Aufnahmen verfügen allerdings über das Potenzial, durch eine Quantifizierung der EBSD-Daten (siehe 6.3) automatische EBSD-basierte Annotation zu generieren. Dies wird im Ausblick 8.3.3.3 weiter ausgeführt.

Die geringe Varianz im Datensatz aufgrund der hohen Qualität und Reproduzierbarkeit der Gefügeaufnahmen ermöglichte erst das Trainieren guter Segmentierungsmodelle mit wenigen Daten. Aufgrund dessen ist das Modell jedoch tendenziell auch beschränkt auf wiederkehrende Aufgaben mit geringer Varianz und dementsprechend wird keine gute Generalisierung für ähnliche Gefügeaufnahmen, z.B. nach anderer Ätzung, erwartet. Diese Übertragbarkeit auf andere Domänen, mit Hilfe der sog. „unsupervised domain adaptation“ (UDA), wurde in einer weiteren Kooperation mit dem Fraunhofer Institut für Werkstoffmechanik in Freiburg untersucht und im Journal NPJ Computational Materials veröffentlicht [237].

Bei der UDA handelt es sich um ein Lernverfahren zur Übertragung von Wissen aus einer Quelldomäne mit einer Vielzahl annotierter Trainingsdaten auf eine Zieldomäne ohne annotierte Trainingsdaten [237]. Dies ist von großem Interesse, wenn der Annotationsprozess in der Zieldomäne kostspielig ist oder wenn Annotationen aus der Quelldomäne leicht verfügbar sind. Zum Testen der Möglichkeiten der UDA wurde das Modell der existierenden REM-Aufnahmen nach elektrolytischer Ätzung zur Segmentierung von REM-Aufnahmen nach Nital Ätzung sowie von LM-Aufnahmen (invertiert für denselben schwarz-weiß Kontrast) verwendet. Die anfangs nicht guten Segmentierungsergebnisse konnten durch Anwendung von UDA stark verbessert werden. Details sind [237] zu entnehmen. In Anbetracht schneller werdender Bildaufnahmen und zunehmender Automatisierung wird die Diskrepanz zwischen annotierten und nicht annotierten Daten in Zukunft höchstwahrscheinlich stark zunehmen, was Methoden des unüberwachten Lernens wie UDA immer interessanter macht. In der Tat sind die Verfügbarkeit und die Kosten von Annotationen in der Materialwissenschaft Hindernisse für eine weit verbreitete Anwendung

von DL, zu deren Überwindung UDA beitragen kann. Dies gilt insbesondere dann, wenn die Daten der Quelldomäne wesentlich kostengünstiger zu annotieren sind, relevante Merkmale für präzise Annotationen aufweisen und wenn die zu überbrückenden Lücken zwischen den Domänen eng genug sind, die Merkmale zwischen den Domänen also vergleichbar sind.

8.3 Unterscheidung von bainitischem und polygonalem Ferrit

Die Segmentierung der lattenförmigen bainitischen Bereiche im vorherigen Kapitel basiert auf den prägnanten visuellen Merkmalen der Lattenstruktur, also einer Betrachtung der Zweitphase. Soll allerdings nur polygonaler Ferrit von bainitischem Ferrit unterschieden werden, ohne Betrachtung der Zweitphase, ist dies rein über visuelle Merkmale schwierig. Zwar sind die Formen unterschiedlich, aber beide Ferritarten weisen überwiegend gleiche Grauwerte auf, mit nur teilweise geringe Unterschieden durch leichte Substrukturen im BF. Daher erfolgt die Unterscheidung BF gegen PF zunächst auf der Basis von EBSD-Daten. Anschließend wird untersucht, ob die EBSD-Daten noch eine weitere Unterteilung des BF in lattenförmige und irreguläre Formen erlaubt (8.3.3.1), und ob die BF/PF-Unterscheidung auch in Form einer DL-Segmentierung möglich ist (8.3.3.3).

8.3.1 Auswertansätze und Modelltraining

BF und PF unterscheiden sich aufgrund der verschiedenen Entstehungsmechanismen in der Versetzungsdichte sowie in der Kornform (2.1.1). Daher sind zur Unterscheidung folgende EBSD-Kennwerte potenziell geeignet: Kernel- und kornbasierte Missorientierungsparameter (GAM, GOS, KAM), Kornform und -größe beschreibende Parameter, die Pattern Qualität bzw. die Auswertung der Textur der Pattern Qualität in einem Korn sowie die Auswertung der Grenzflächen in einem Korn, wie bereits in der Methodikentwicklung der korrelativen Charakterisierung und Quantifizierung (6.3) herausgearbeitet und visualisiert wurde. Gegenüber dem PF zeichnet sich BF üblicherweise durch niedrigere Patternqualität, höhere Missorientierungen, das Vorhandensein von Subkorn Grenzen und einer irregulärer Form aus (Abbildung 6-9).

Die Auswertung kann sowohl objektweise als auch pixelweise erfolgen (6.3). Folgende EBSD-Kennwerte wurden sowohl für die objekt- als auch die pixelweise Auswertung verwendet: IQ, CI, GAM, GOS, KAM 1. Ordnung, KAM 3. Ordnung. Gegenüber der pixelweisen Auswertung ermöglicht die objektweise Auswertung die Extraktion weiterer Parameter: die Objektgröße, morphologische Parameter des Objektes sowie die Anteile und Dichte der Grenzflächen im

Objekt. Eine Gegenüberstellung und Zusammenfassung aller Parameter wurde bereits in 6.3 gezeigt.

Die pixelweise Klassifizierung ist deutlich simpler, da lediglich die o.g. sechs Parameter berücksichtigt werden, wohingegen bei der objektweisen Klassifizierung bis zu 67 Parameter eingehen können (vor dem Entfernen korrelierender Merkmale). Zwar ist es möglich, dadurch mehr Informationen und auch komplexere Sachverhalte zu erfassen, allerdings ist durch die Vielzahl an Parametern auch der Fluch der Dimensionalität zu berücksichtigen (2.3.1). Außerdem wird bei der pixelweisen Auswertung schneller eine große Datenmenge erreicht (pro Bild ist die Anzahl der Pixel \gg der Anzahl der Körner). Durch das weniger komplexe Modell durch weniger Parameter und das leichte Generieren vieler Trainingsdaten ist in den ersten Modell-Iterationen eine bessere Generalisierung des pixelweisen gegenüber dem objektweisen Ansatz zu erwarten. Um dieselbe Menge an Trainingsdaten und diese Generalisierung beim objektweisen Modell zu erlangen, müssen mehr Proben berücksichtigt werden. Dafür gestattet der objektweise Ansatz potenziell noch komplexere Fragestellungen, bei denen die Objektform eine Rolle spielt, bspw. eine weitere Unterscheidung des bainitischen Ferrits in lattenförmige und irregulär geformte Körner. Diese Unterscheidung wird in Kapitel 8.3.3.1 behandelt.

Die Auswahl der Trainingsdaten für das ML-Modell erfolgt für pixel- und objektweisen Ansatz auf dieselbe Weise (Abbildung 8-6). In der LM-Aufnahme oder einer Überlagerung von LM mit EBSD-Karten werden BF- und PF-Referenzbereiche markiert. Idealerweise erfolgt dies im ersten Schritt an Referenzzuständen. Anschließend wird die Aufnahme mit den Markierungen binarisiert. Über diese binäre Maske werden Trainingsdaten für die markierten Pixel bzw. Objekte generiert.

Mit diesen Trainingsdaten wird anschließend ein erster Klassifikator trainiert. Der Trainingsprozess sollte iterativ sein (Abbildung 8-7). Das Modell, das über Referenzproben oder -bereiche erstellt wurde, wird auf neue Nicht-Referenz-Proben angewendet. Mit Hilfe der korrelativen LM-Aufnahme kann die Klassifizierung beurteilt werden. Korrekt oder nicht korrekt klassifizierte Bereiche können in der Folge wiederum markiert und dem Modell als neue Trainingsdaten hinzugefügt werden. Durch diesen iterativen Prozess wird das Modell immer robuster und besser generalisierend.

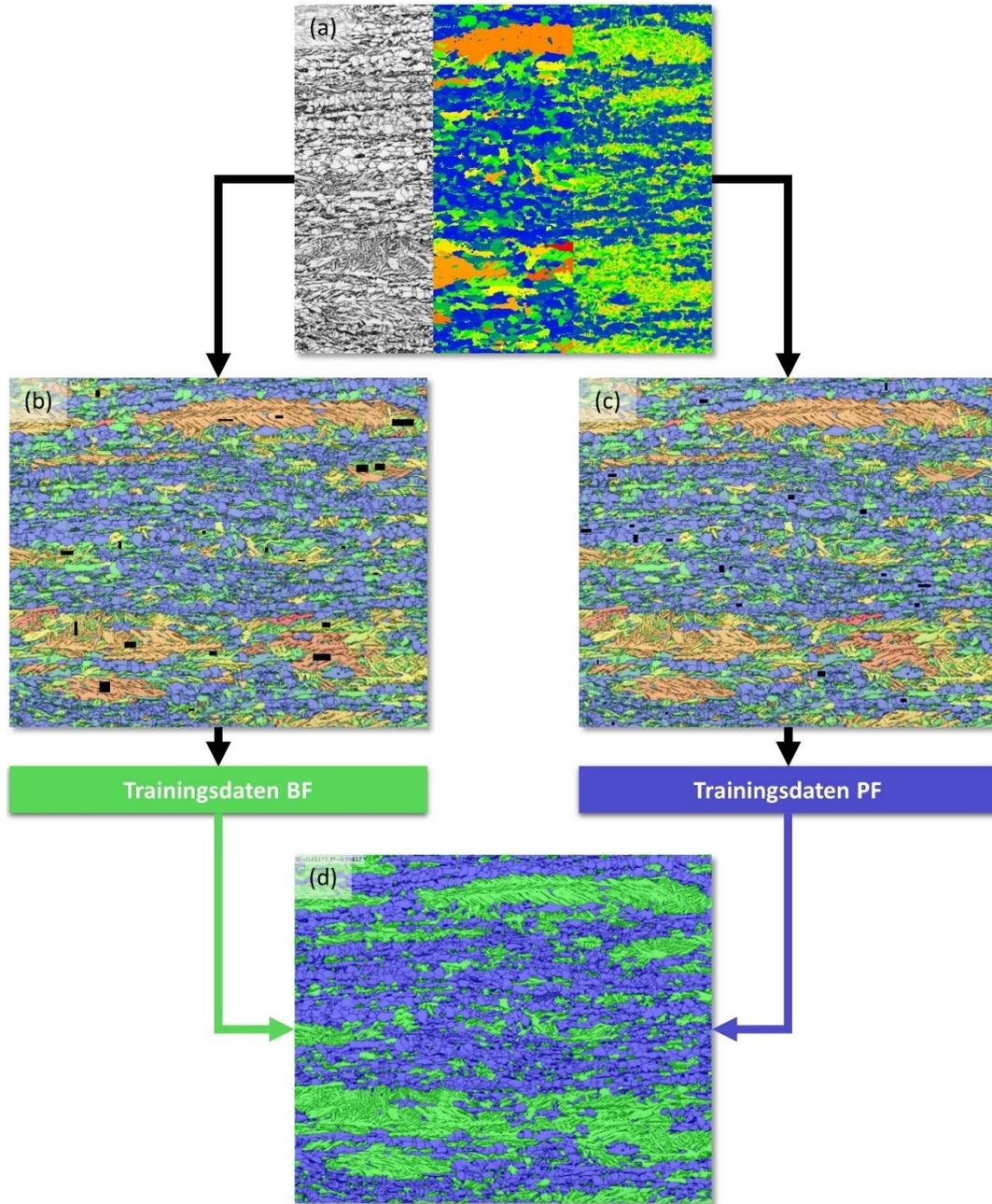


Abbildung 8-6: Generierung der Trainingsdaten: (a) die LM-Aufnahme wird mit geeigneten EBSD-Karten überlagert. (b), (c) in den Überlagerungen werden Referenzbereiche von bainitischem und polygonalem Ferrit markiert (schwarze Pixel). Aus diesen Bereichen werden EBSD-Daten extrahiert als Trainingsdaten für das ML-Modell. (d) Unterscheidung von bainitischem und polygonalem Ferrit durch das ML-Modell.

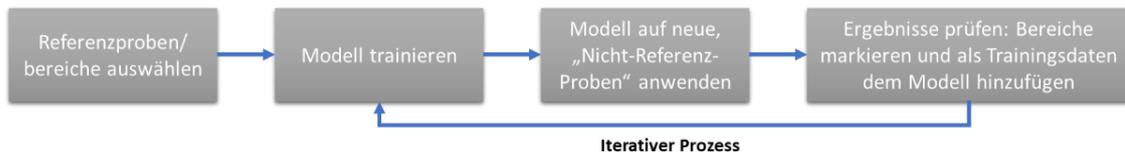


Abbildung 8-7: Iterativer Trainingsprozess eines ML-Modells zur Unterscheidung von bainitischem und polygonalem Ferrit.

Da die Ergebnisse der pixel- und objektweisen Klassifizierung vergleichbar sind und das Modell der pixelweisen Klassifizierung das einfachere ist, mehr Trainingsdaten enthält und daher besser generalisieren sollte, wird sich hier auf die Ergebnisse der pixelweisen Klassifizierung beschränkt. Die objektweise Klassifizierung wird allerdings im Ausblick für eine weitere Unterscheidung von irregulärem und lattenförmigem bainitischem Ferrit betrachtet (8.3.3.1).

Zwischen IQ und CI sowie zwischen den Missorientierungsparametern ist eine gewisse Korrelation zu erwarten. Eine Prüfung der linearen Abhängigkeit über das Bestimmtheitsmaß ergab eine Korrelation von $R^2 = 0,84$ zwischen KAM 1. und 3. Ordnung sowie $R^2 = 0,80$ zwischen GAM und GOS. Letztlich wurde entschieden, alle Parameter weiter zu verwenden, um das Modell durch weniger Parameter nicht noch weiter zu vereinfachen. In der ersten Modell-Iteration wurden lediglich Referenzbereiche berücksichtigt. Bereiche des bainitischen Ferrits wurden aus einer vollumgewandelten, vollbainitischen Probe ausgewählt, Bereiche des polygonalen Ferrits aus einer Zweiphasenstahlprobe mit großen, zusammenhängenden Bereichen von klar zu erkennendem polygonalem Ferrit. Das Modell Training erfolgte in der MATLAB Classification Learner App [222].

Ein DT erreichte dabei eine Kreuzvalidierungs-Genauigkeit von 100 %. Die perfekte Trennung der Trainingsdaten über einen einfachen Klassifikator spiegelt die gezielt ausgewählten, klaren Referenzbereiche wider. Dieses Referenzmodell wurde im nächsten Schritt auf neue, nicht-Referenzproben mit typischen Multiphasen-Stahlgefügen aus Ferrit und Bainit angewendet. Basierend auf den guten, jedoch noch nicht optimalen Ergebnissen wurden Bereiche dieser Proben als neue Trainingsdaten dem Modell hinzugefügt. In seiner zweiten Iteration erreichte ein RF (boosted trees Algorithmus) die beste Kreuzvalidierungs-Genauigkeit von 96,1 %. D.h. die Trainingsgenauigkeit hat abgenommen unter angenommener Verbesserung der Generalisierung des Modells.

Durch die pixelweise Klassifizierung kann ein Korn sowohl als BF als auch als PF klassifizierte Pixel enthalten (Abbildung 8-8a). Dies ist von einem metallurgischen Standpunkt nicht sinnvoll, weshalb dieser Sachverhalt durch geeignete Nachbearbeitung ausgebessert werden sollte.

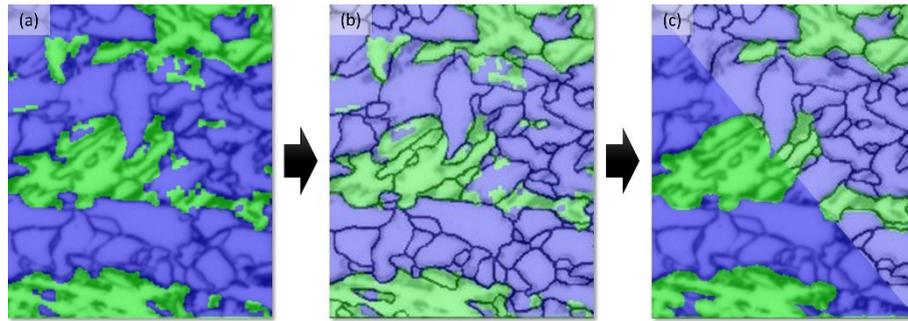


Abbildung 8-8: Post-processing der pixelweisen Klassifizierung. (a) nach der pixelweisen Klassifizierung können Körner sowohl als bainitischer Ferrit als auch als polygonaler Ferrit klassifizierte Pixel enthalten. (b) objektweise Betrachtung mit Hilfe der EBSD-Korngrenzenkarte und Durchführung eines Mehrheitsentscheids. (c) Nach dem Mehrheitsentscheid enthält jedes Korn entweder nur bainitischen oder polygonalen Ferrit.

Über die EBSD-Korngrenzenkarte wurde auch hier eine objektweise Betrachtung durchgeführt: in jedem Objekt, also in jedem Korn, fand ein Mehrheitsentscheid bainitischer gegen polygonalen Ferrit statt, d.h. basierend auf der Mehrheit der klassifizierten Pixel wurde dem Korn eine Gesamtklassifizierung (PF oder BF) zugeordnet (Abbildung 8-8b, c).

8.3.2 Ergebnisse und Diskussion

Abbildung 8-9 bis Abbildung 8-11 zeigen Ergebnisse der pixelweisen Klassifizierung (inklusive post-processing) angewendet auf ganze Aufnahmen. Der voll-bainitische und der PF-Referenzzustand wurden korrekt klassifiziert. Bei der Anwendung auf Proben mit unterschiedlichen Anteilen an sowohl BF als auch PF erscheinen die Ergebnisse ebenfalls plausibel und entsprechen dem Expertenkonsens. Insbesondere große zusammenhängende BF-Bereiche werden gut erkannt. Auch die Grenzen der BF-Bereiche werden gut getroffen.

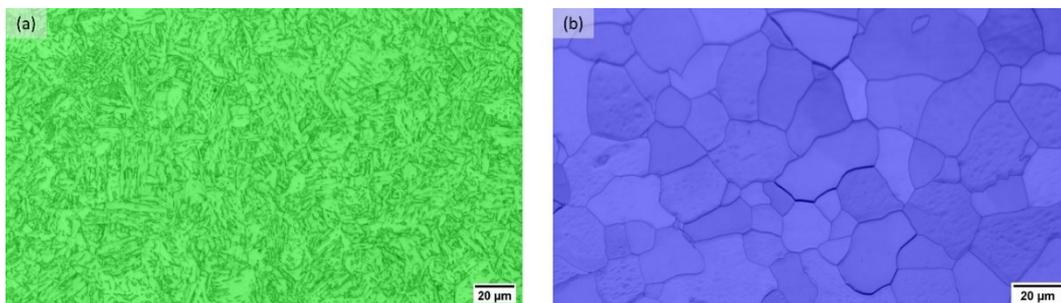


Abbildung 8-9: (a) LM-Aufnahme einer vollbainitischen Probe, überlagert mit BF/PF Klassifizierung: die Probe wird korrekt als 100 % BF klassifiziert. (b) IQ-Karte des PF-Referenzzustandes, überlagert mit BF/PF Klassifizierung: die Probe wird korrekt als 100 % PF klassifiziert (in diesem Beispiel wurde keine korrelative LM-Aufnahme erzeugt).

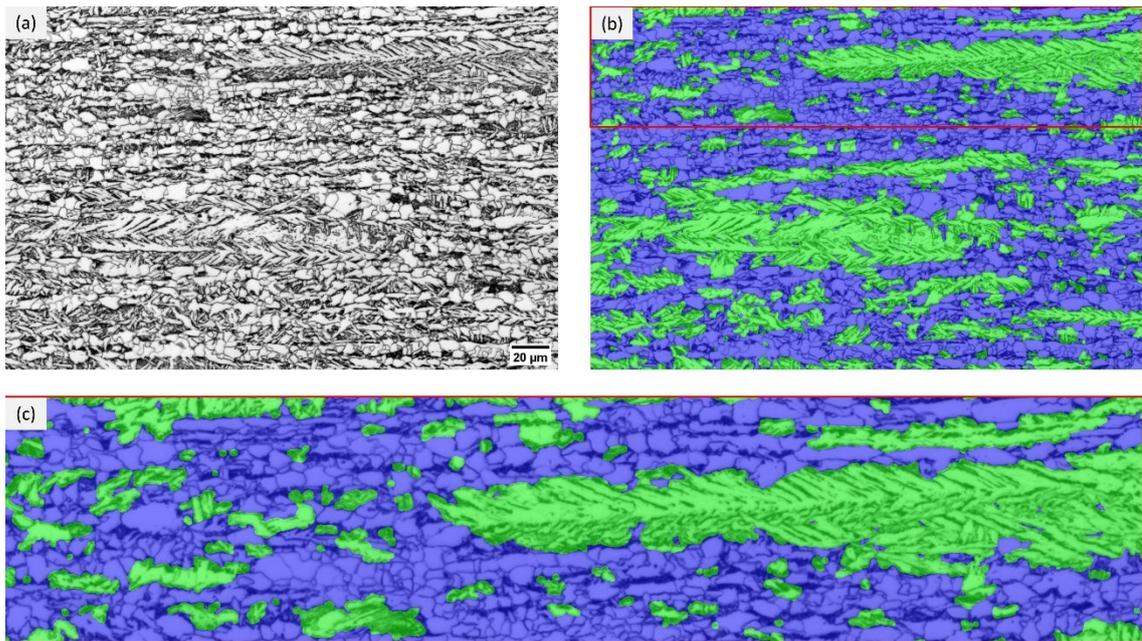


Abbildung 8-10: (a) LM-Aufnahme von Probe M890. (b) Überlagerung LM mit BF (grün)/ PF (blau) Klassifizierung: das Ergebnis erscheint plausibel und entspricht dem Expertenkonsens. (c) Detailausschnitt aus (b).

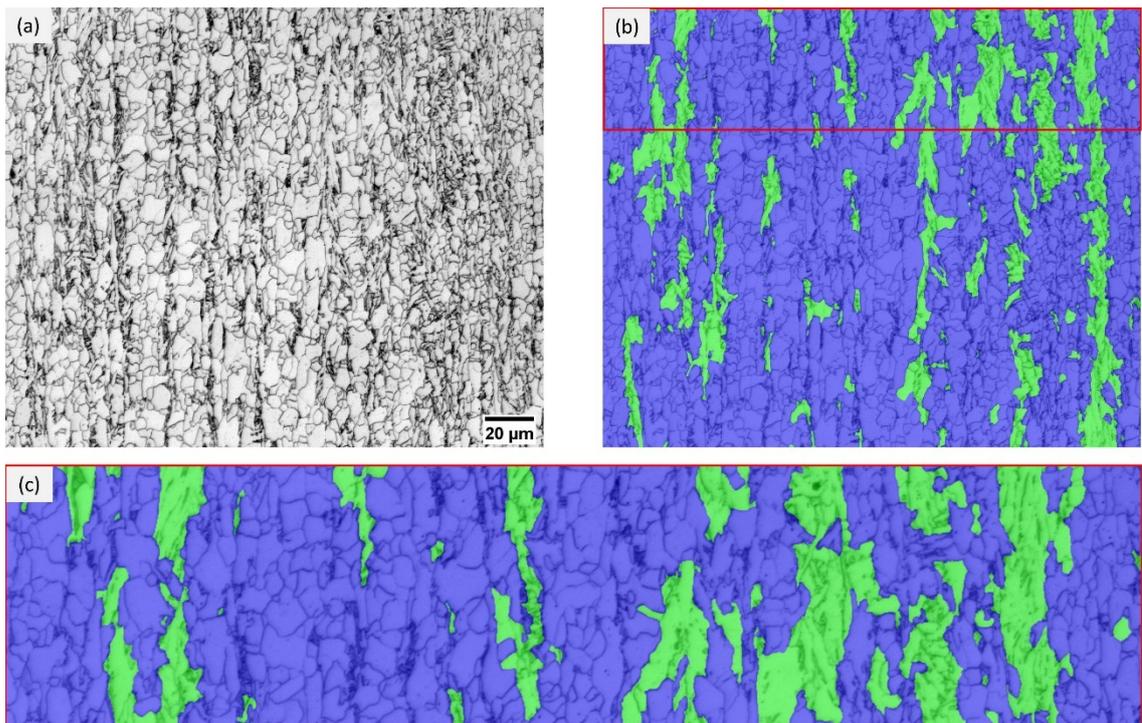


Abbildung 8-11: (a) LM-Aufnahme von Probe 1053. (b) Überlagerung LM mit BF (grün)/ PF (blau) Klassifizierung: das Ergebnis erscheint plausibel und entspricht dem Expertenkonsens. (c) Detailausschnitt aus (b).

Generell gilt anzumerken, dass keine finale Grundwahrheit für die Beurteilung dieser Aufnahmen existiert. Das verwendete Modell geht zwar zurück auf klar definierte Referenzbereiche und eine möglichst objektive Beurteilung durch den korrelativen Ansatz, dennoch bleibt bei der Beurteilung oder Interpretation mancher Bereiche in diesen Aufnahmen eine gewisse

Restunsicherheit. Nichtsdestotrotz stellt das Modell die objektivste und vor allem die reproduzierbarste Unterscheidung von bainitischem und polygonalem Ferrit dar und stimmt mit dem Expertenkonsens überein. Eine bestmögliche Konzipierung und Evaluierung des Modells wäre allerdings möglich, indem mittels Abschreckdilatometer gezielt Proben mit unterschiedlichen Phasenanteilen, die über die Auswertung der Dilatometerkurven zugänglich sind, hergestellt würden und diese Phasenanteile mit den Ergebnissen der BF/PF-Klassifizierung verglichen würden.

Der Mehrwert des ML-Ansatz gegenüber einer Schwellwert-basierten Trennung auf Basis eines oder zweier EBSD-Parameter, wie im Stand der Forschung (siehe 2.4) beschrieben, besteht in der optimalen Trennung der Daten auf Basis des ML-Algorithmus anstelle des manuellen Suchens geeigneter Schwellwerte, sowie dem Verwenden mehrerer EBSD-Parameter, bei denen bei manueller Betrachtung das Finden geeigneter Schwellwerte kaum möglich wäre. Ein Beispiel aus der Literatur zur Kombination von EBSD und ML ist die Arbeit von [238], die sog. „Variant Pairings“ mit ML auswerten, um unterschiedliche Gefüge mit Martensit und Bainit zu unterscheiden, und von [181], die KAM, Band Slope und GOS mit ML zur Unterscheidung von Ferrit und primärem sowie sekundärem Martensit in einem Quenching & Partitioning Stahl kombinieren. Generell ist anzunehmen, dass in EBSD-Daten sehr viel Potenzial steckt, dass zur Gefüge-Klassifizierung und -Quantifizierung bisher noch nicht vollständig ausgenutzt wurde, und mittels ML besser entfaltet werden kann als über eine manuelle Auswertung von nur wenigen Parametern.

Durch das Verwenden mehrerer EBSD-Parameter wird die Auswertung außerdem robuster gegenüber Messeinstellungen oder Messqualität. Zwar schlagen DeArdo et al. [174] eine Unterscheidung von polygonalem, nicht-polygonalem, azikularem und bainitischem Ferrit sowie kohlenstoffreicher Phasen rein über eine Multipeakanalyse der IQ-Verteilung vor. Dieser Ansatz war auf die in dieser Arbeit betrachteten Gefüge allerdings nicht übertragbar, da insbesondere das Setzen der Grenzen mit großer Unsicherheit verbunden war, fast bis hin zu Willkür. Auch in der Literatur berücksichtigt der Großteil der Veröffentlichungen nicht nur die IQ-Karte, sondern Missorientierungsparameter zur Unterscheidung verschiedener Ferritarten. Die verbesserte Robustheit durch den hier präsentierten Ansatz zeigt sich auch beim Betrachten einer unzureichend präparierten Probe (IQ und KAM-Karte in Abbildung 8-12). Kratzer äußern sich z.B. in einer niedrigeren IQ oder höheren Missorientierungen, d.h. ein Kratzer in einem PF-Bereich könnte dazu führen, dass der Bereich fälschlicherweise als BF erkannt wird. Dennoch wird die BF/PF Unterscheidung dadurch nicht negativ beeinflusst.

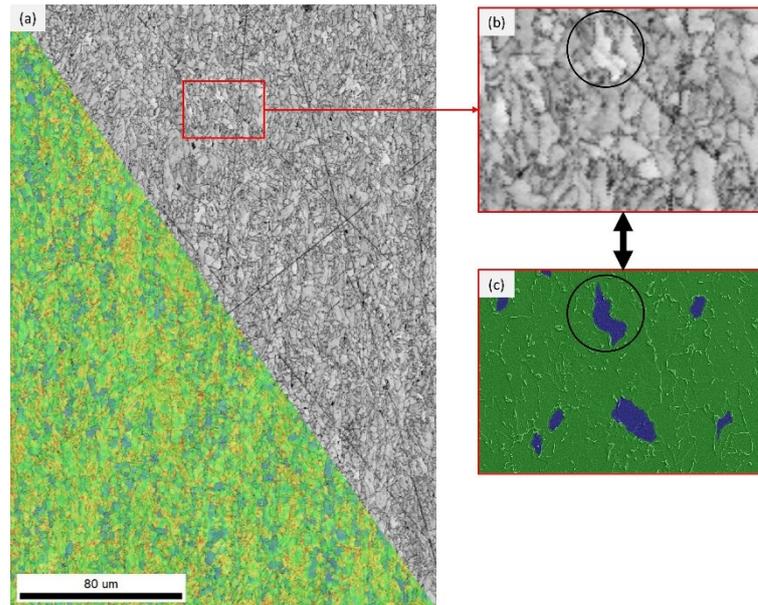


Abbildung 8-12: Robustheit des Klassifizierungsmodells gegenüber Messartefakten. (a) IQ und KAM-Karte einer unzureichend präparierten Probe: mehrere Kratzer sind deutlich sichtbar. (b) Detail aus (a): ein Kratzer verläuft direkt durch ein PF-Korn (schwarzer Kreis). (c) Korrelative REM-Aufnahme, überlagert mit der BF/PF Klassifizierung: die Klassifizierung wird durch die Kratzer nicht negativ beeinflusst, das PF-Korn wird korrekt erkannt.

Ein gewisses Verbesserungspotenzial besteht noch in der Art und Weise, wie die C-reiche Zweitphase berücksichtigt wird. In der vorliegenden Auswertung wird sie nicht explizit berücksichtigt, sondern ist Teil eines bainitischen Bereichs. Vereinzelt kann es jedoch vorkommen, dass ein großes, reines Zweitphase-Objekt als Bainit klassifiziert wird. Dadurch kann der Anteil bainitischen Ferrits leicht überschätzt werden. In zukünftigen Arbeiten könnte eine separate Auswertung der Zweitphase ergänzt werden, um große Objekte, die nicht innerhalb bainitischer Bereiche liegen, gesondert zu erfassen.

Tabelle 8-7 zeigt ein Ranking der sechs im Modell verwendeten Merkmale mit Hilfe des MRMR-Algorithmus. Die Wichtigkeit der Missorientierungsparameter deckt sich mit in der Literatur beschriebenen Auswertungen. Dass IQ und CI im Vergleich zu Missorientierungsparametern als weniger wichtig erachtet werden, erscheint plausibel, da die Betrachtung lediglich eines Pixels nicht immer repräsentativ für die niedrigere Pattern Qualität im gesamten Bainitbereich sein muss.

Analog zu Kapitel 7 stellt die Betrachtung dieser Aufgabenstellung in einem ganzheitlichen Ansatz einen entscheidenden Mehrwert dar. Eine geeignete Probenauswahl ermöglichte das Auswählen von Referenzbereichen, die eine einfache und klare Zuordnung der Grundwahrheit zum Trainieren der ersten Modell-Iterationen erlaubten. In Bezug auf die Probenkontrastierung erwies sich eine Nital-Ätzung nicht nur als optimal für die Registrierung der korrelativen Aufnahmen (6.1), sondern auch als benötigt für eine korrekte Interpretation der Klassifizierung

durch die Korngrenzen-Kontrastierung. Überdies ist Nital eine der etabliertesten Ätzungen und sehr gut kontrollierbar, sodass für eine etwaige Serienauswertung von reinen LM-Aufnahmen reproduzierbare Kontrastierungen angenommen werden können. Eine entscheidende Rolle kam wiederum der korrelativen Charakterisierung zu. Nur durch die korrelativen LM- oder REM-Aufnahmen ist eine korrekte Evaluierung der EBSD-basierten Unterscheidung möglich. Darüber hinaus ist durch den korrelativen Ansatz eine Übertragung der geschaffenen Referenzen auf die reine Beurteilung von LM- oder REM-Aufnahmen realisierbar. Der Einsatz korrelativer Mikroskopie stellt im Vergleich zu anderen Arbeiten aus der Literatur ein Alleinstellungsmerkmal dar. Dort werden keine korrelativen Ansätze verwendet und die Phasentrennung erfolgt rein über EBSD (siehe 2.4), wobei eine finale Gefügebeurteilung rein über EBSD, bedingt durch die geringere Auflösung ohne Informationen über Karbidmorphologien, nicht immer möglich ist.

Tabelle 8-7: Merkmals-Ranking der pixelweisen Klassifizierung basierend auf MRMR-Algorithmus.

Rang	Merkmal	Parametergruppe
1	GOS	Missorientierung
2	KAM 1. Ordnung	Missorientierung
3	KAM 3. Ordnung	Missorientierung
4	GAM	Missorientierung
5	IQ	Pattern Qualität
6	CI	Pattern Qualität

8.3.3 Ausblick

8.3.3.1 Unterscheidung von irregulärem und lattenförmigem bainitischem Ferrit

Der Labelprozess von bainitischem und polygonalem Ferrit gestaltete sich vergleichsweise einfach. Die weitere Trennung des bainitischen Ferrits in lattenförmigen bainitischen Ferrit (LF) und irregulären bainitischen Ferrit (IF) ist allerdings deutlich komplizierter. Zwar gibt es qualitative Anhaltspunkte zum Trennen dieser beiden Formen des bainitischen Ferrits, natürlich die Form, aber auch hinsichtlich Missorientierungswinkelverteilung, oder etwas geringerer Missorientierungen und Substruktur im IF (2.1.1). Generell erwies es sich dennoch als sehr schwierig, diese Betrachtungen in sichere Label in ausreichender Zahl zu übertragen.

Die Unterscheidung von IF, LF und PF erfolgt über eine objektweise Auswertung, mit Parametern wie in 6.3 beschrieben, um auch formbeschreibende Parameter berücksichtigen zu können. Der Label-Prozess erfolgt wie bereits in 8.3.1 beschrieben, d.h. im Bild werden die jeweiligen IF-, LF- und PF-Objekte markiert. Die Zuteilung von PF und BF kann wie gehabt erfolgen. Weiterhin

ist es möglich, über die pixelweise EBSD-basierte BF/PF-Klassifizierung alle PF-Objekte aus der zu annotierenden Mikroskopaufnahme zu entfernen. Durch manuelles Filtern der BF-Bereiche nach geeigneten Parametern, bspw. Kornform, Missorientierungen oder dem Vorhandensein von Sub-Korngrenzen, können anschließend IF-Objekte identifiziert werden, siehe Abbildung 8-13.

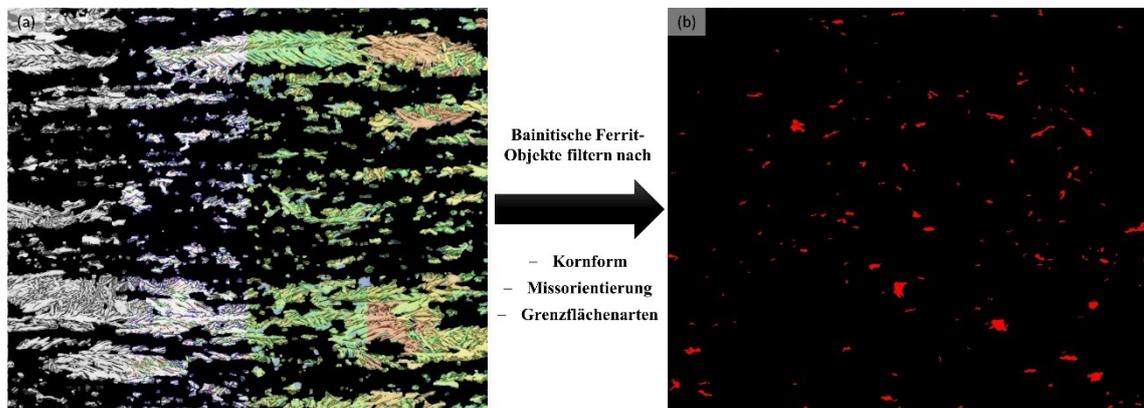


Abbildung 8-13: (a) Überlagerung aus LM und EBSD-Karten. PF-Bereiche wurden basierend auf der BF/PF-Klassifizierung entfernt. (b) Durch Filtern nach bspw. Kornform, Missorientierung oder Grenzflächenarten können IF-Objekte identifiziert werden.

Letztlich wurden 1791 Objekte gelabelt. Pro Objekt wurden jeweils 67 Parametern erhoben (siehe Tabelle 6-1). Durch Entfernen korrelierender Merkmalen ($R^2 > 0,90$) wurden diese auf 52 Merkmale reduziert. Mittels MATLAB Classification Learner App wurden verschiedene Modelle trainiert. Ein RF (boosted trees Algorithmus) erreichte mit einer 5-fach Kreuzvalidierungs-Genauigkeit von 94,5 % die besten Ergebnisse (Tabelle 8-8). Precision, Recall und F1 Scores sind für alle drei Klassen hoch.

Tabelle 8-8: Konfusionsmatrix der IF/LF/PF Klassifizierung.

Accuracy = 94,5 %, F1 Score = 94,1 %					
Vorhersage					
		IF	LF	PF	Precision [%]
Grund- wahrheit	IF	591	8	3	98,2
	LF	21	397	25	89,6
	PF	14	28	704	94,4
Recall [%]		94,4	91,7	96,2	
F1 Score [%]		96,3	90,6	95,3	

Abbildung 8-14 und Abbildung 8-15 zeigen die Klassifizierung gesamter Aufnahmen. Diese ersten Ergebnisse sind vielversprechend. Die IF-Anteile in der vollbainitischen Probe (Abbildung

8-14) erscheinen realistisch, der IF in Abbildung 8-15 wird dem LF gegenüber jedoch unterschätzt.

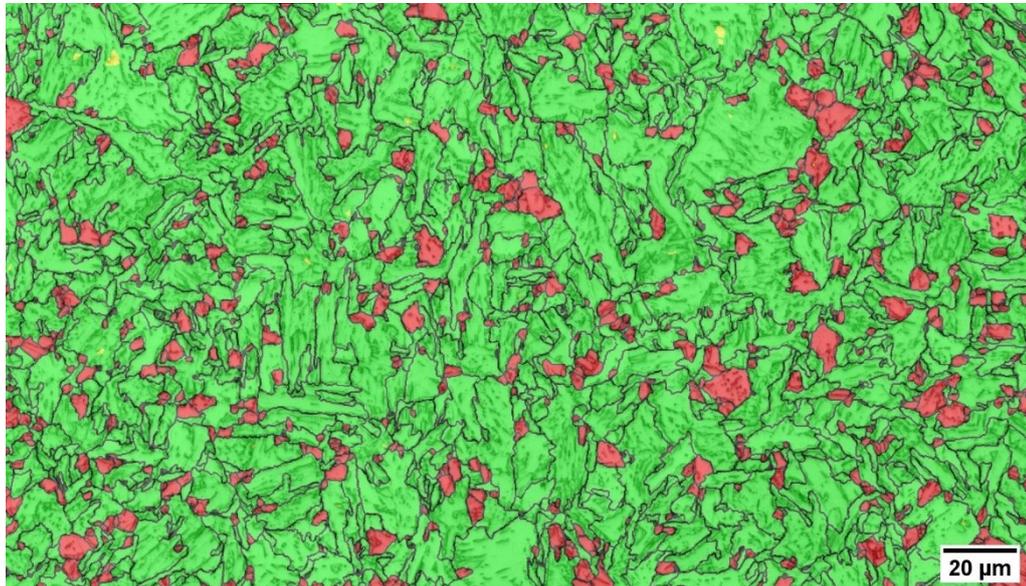


Abbildung 8-14: IF/LF/PF Klassifizierung der Probe 148 (vollbainitisch). IF = rot, LF = grün.

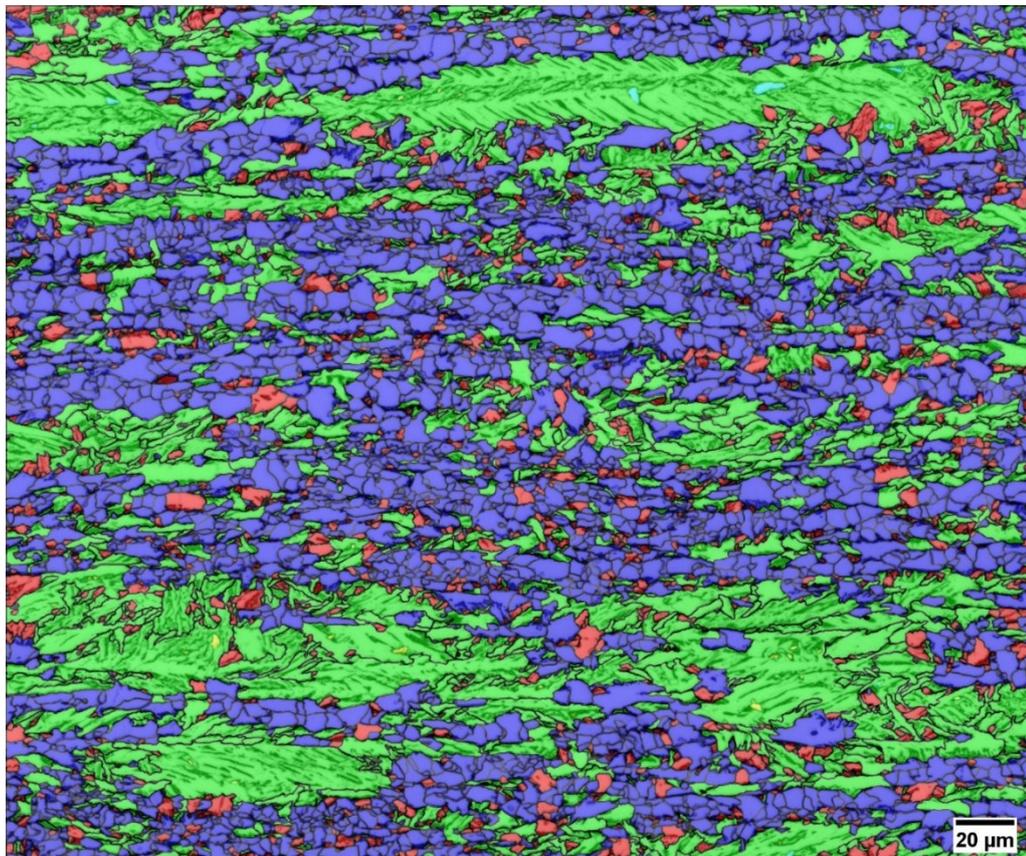


Abbildung 8-15: IF/LF/PF Klassifizierung der Probe M890 (Position 3). IF = rot, LF = grün, PF = blau.

Zur besseren Interpretation des Modells wurde erneut ein Merkmals-Ranking mittels MRMR-Algorithmus durchgeführt (Tabelle 8-9). Die 15 wichtigsten Parametern enthalten Merkmale aus allen Hauptgruppen: Missorientierungsparameter, Parameter der Pattern Qualität sowie deren Texturauswertung, Parameter der Grenzflächenarten sowie der Morphologie. Gemäß dieses Rankings erscheinen Missorientierungsparameter und die Texturauswertung der IQ am wichtigsten (Rang 1-5 sowie 9 der ersten 15 Parameter), während die Objektmorphologie trotz zu erwartenden starken Einflusses (unterschiedliche Kornformen der Ferritarten) erst an Position zwölf gewertet wird. Dies mag nicht sehr intuitiv sein und deckt sich auch nicht mit der Literatur, in der bei der Unterscheidung unterschiedlicher Ferritarten die Kornform einer der drei oder vier berücksichtigten Parameter ist (Korngröße und Aspektverhältnis für Bainit vs. Ferrit [177] sowie azikularen, polygonalen und bainitischen Ferrit [178,179]). Da es aber auch Arbeiten gibt, die für die Unterscheidung Bainit vs. Ferrit lediglich Missorientierungsparameter verwenden und die Kornform nicht berücksichtigen [176], kann angenommen werden, dass Missorientierungen die aussagekräftigeren Parameter sind. Durch die vorgestellte Auswertung kann mehr Information aus den Missorientierungsparameter herausgezogen werden. Außerdem kann die Kornform indirekt in anderen Parametern wie der Grenzflächenart oder der Textur der Pattern Qualität, z.B. durch die erkennbaren Lattengrenzen in den lattenförmigen Bainitbereichen, versteckt sein.

Tabelle 8-9: Merkmals-Ranking der objektweisen Klassifizierung von IF, LF, PF basierend auf MRMR-Algorithmus.

Rang	Merkmal	Parametergruppe
1	GOS_Mean	Missorientierung
2	Energy_A_IQ	Textur der Pattern Qualität
3	KAM_1_Min	Missorientierung
4	GAM_SD	Missorientierung
5	LBP1_10_IQ	Textur der Pattern Qualität
6	CI_SD	Pattern Qualität
7	GrainBoundary_high	Grenzflächenart
8	GAM_Min	Missorientierung
9	CI_Max	Pattern Qualität
10	GrainBoundary_total_rel	Grenzflächenart
11	Contrast_Mean_IQ	Textur der Pattern Qualität
12	AspectRatio	Objektmorphologie
13	KAM_1_SD	Missorientierung
14	LBP1_6_IQ	Textur der Pattern Qualität
15	IQ_Max	Pattern Qualität

Eine Verbesserung dieser Klassifizierung ist einerseits über eine größere und bessere Datenbasis zu erwarten. Andererseits könnte auch ein „hybrider Ansatz“ aus einer Kombination des ML-

Ansatzes mit den theoretischen Grundlagenbetrachtungen zur Missorientierungswinkelverteilung Anwendung finden. Aus der Missorientierungswinkelverteilung können qualitativ Rückschlüsse auf die BF- und PF-Anteile im gesamten Messbereich gezogen werden. Winkel zwischen $2-15^\circ$ sollten überwiegend oberem Bainit angehören, Winkel zwischen $15-55^\circ$ granularer Bainit bzw. irregulärem Ferrit und polygonalem Ferrit, während Winkel $>55^\circ$ dem unteren Bainit zuzuordnen wären. Diese globalen Informationen des gesamten Messbereichs könnten als zusätzliche Eingabeparameter verwendet werden, um zukünftig die orts aufgelöste Bestimmung von PF sowie IF und LF zu verbessern.

8.3.3.2 Optimierte Gefüge-Quantifizierung

Die separate Erfassung von BF und PF ermöglicht einen neuen Detailgrad der Gefüge-Quantifizierung. Es sind nicht nur die Phasenanteile bekannt, es können auch Korngrößen, morphologische Parameter und Ausprägungen der zweiten Phase jeweils separat für BF- und PF-Bereiche bestimmt werden (Abbildung 8-16). Zusätzlich könnte auch die Anordnung der BF- und PF-Bereiche (z.B. mittlere freie Weglängen oder Homogenität [239]) erfasst werden.

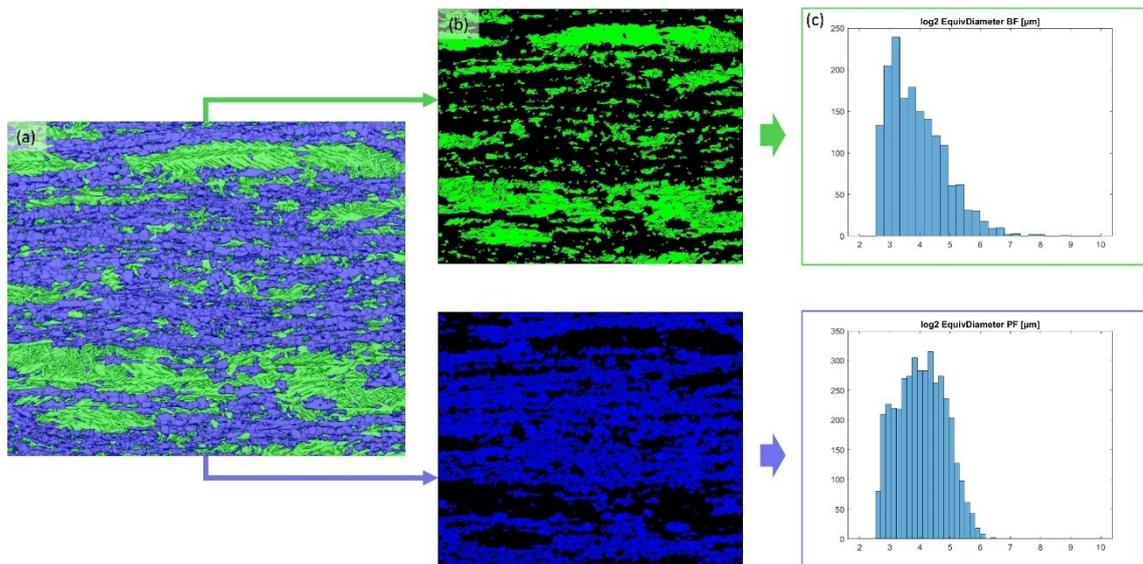


Abbildung 8-16: Separate Gefügequantifizierung von BF- (grün) und PF-Bereichen (blau). (a) Überlagerung LM-Aufnahme mit Ergebnisbild. (b) Aufteilung des Ergebnisbildes in BF- und PF-Bereiche. (c) Separate Quantifizierung der BF- und PF-Bereiche, z.B. Bestimmung der Korngrößenverteilung.

Im Rahmen dieses Promotionsvorhabens wurde in einer Masterarbeit [240] diese fortgeschrittene Gefügeanalyse auf Proben aus sog. Temperatur-Keil-Versuchen (engl. accelerated temperature profile, ATP) angewandt. Bei diesem Versuch wird ein Grobblech über seine Länge unterschiedlich stark gekühlt, wodurch verschiedene Endkühltemperaturen realisiert werden

können. Dies resultiert in unterschiedlichsten Gefügeausprägungen entlang des Blechs, während andere Parameter wie Legierung, Umformung und Startkühltemperatur identisch bleiben. Dies wiederum erlaubt gezielte und systematische Untersuchungen zu Gefüge-Eigenschaftskorrelationen. Aus einem solchen ATP-Versuch wurden aus einem Blech vier Proben mit unterschiedlicher Endkühltemperatur, Gefügeausprägung sowie mechanischer Eigenschaften entnommen und korrelativ gemäß 6.3 charakterisiert. Wie in 8.3 wurden BF- und PF-Bereiche über eine EBSD-basierte pixelweise Klassifizierung bestimmt und separat ausgewertet (Korngröße, Kornform etc.).

Mittels ML wurde ein Regressionsmodell zur Vorhersage der mechanischen Eigenschaften basierend auf allen extrahierten Gefügemerkmalen erstellt. Zusätzlich wurde ein Merkmals-Ranking erstellt (Abbildung 8-17). Gemäß dieses Rankings gehen die Korngröße des bainitischen und des polygonalen Ferrits als separate Kenngrößen ein, als wichtigster sowie als viertwichtigster Parameter. Dies zeigt die Relevanz und Notwendigkeit einer solch detaillierten, weiterentwickelten Gefügequantifizierung.

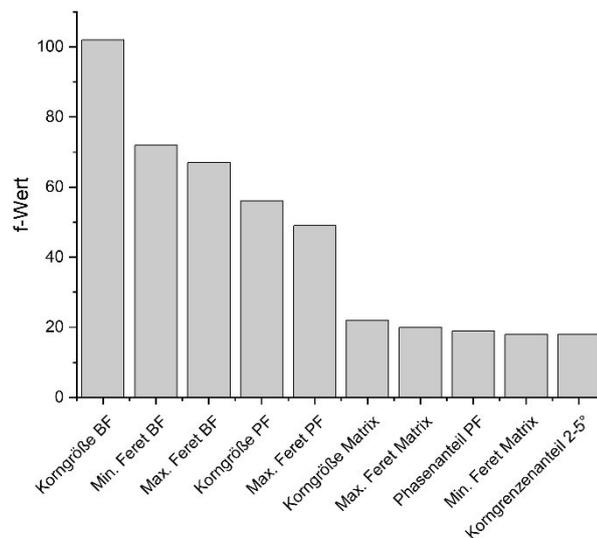


Abbildung 8-17: Merkmals-Ranking des Regressionsmodells zur Vorhersage der Härte der ATP-Proben.

8.3.3.3 Reine lichtmikroskopische Auswertung

Eine korrelative Charakterisierung stellt immer einen erhöhten experimentellen Aufwand dar. Allerdings ist es denkbar, die Auswertung, nachdem über den korrelativen Ansatz Referenzen geschaffen wurden, für eine Serienanwendung auf eine reine EBSD oder potenziell auf eine reine LM-Auswertung zu reduzieren. Eine LM-Auswertung ist insbesondere interessant, weil das LM die einfachste Charakterisierungsmethode darstellt und deutlich schneller als eine EBSD-Messung ist. Der konventionelle Ansatz zur Unterscheidung von BF und PF rein über die LM-

Aufnahme wäre eine objektweise Auswertung. Die LM-Aufnahme würde segmentiert werden zur Erfassung aller Korngrenzen. Diese Segmentierung würde eine Definition von Objekten und damit eine objektweise Auswertung ermöglichen. Geeignete Parameter zur Unterscheidung wären die Kornmorphologie sowie Bildtextur-Parameter.

Zur Beurteilung des Potenzials dieses Ansatzes wurde folgender Datensatz generiert. Die EBSD Korngrenzenkarte wird zur Definition der Objekte in der korrelativen Nital geätzten LM-Aufnahme verwendet. Die Korngrenzenkarte entspricht einer perfekt segmentierten LM-Aufnahme und stellt damit das „best-Case“ Szenario einer objektweisen LM-Auswertung dar. Aus mehreren LM-Aufnahmen werden objektweise Daten erzeugt. Folgende „LM-Parameter“ werden erhoben: Parameter der Kornmorphologie, Bildtextur-Parameter pro Korn (Haralick, LBP, siehe 2.2.4) und simple Grauwertistogramm-Statistiken pro Korn (Mittelwert, Standardabweichung, Entropie). Randobjekte werden nicht berücksichtigt. Die Label der Objekte (bainitischer oder polygonaler Ferrit) werden aus der pixelweisen EBSD-basierten Klassifizierung übertragen. Letztlich besteht der Datensatz aus 11176 Objekten. Mit diesem Datensatz wird ein ML-Modell trainiert, dass die Objekte anhand der LM-Parameter in bainitischen und polygonalen Ferrit unterscheidet. Das Klassifizierungsergebnis wird in der Folge mit der EBSD-basierten Klassifizierung verglichen. Dadurch wird bestimmt, wie gut eine LM-basierte objektweise BF/PF-Klassifizierung maximal sein kann.

Zunächst werden im Datensatz korrelierende Merkmale (Bestimmtheitsmaß $R^2 > 0,85$) entfernt. Das Modelltraining erfolgt wiederum in der MATLAB Classification Learner App. Aufgrund der Größe des Datensatzes wird die Genauigkeit via 25 % Holdout-Validierung⁸ bestimmt. Dazu werden jeweils ML-Modelle unter Berücksichtigung der Morphologie, der Bildtextur sowie der Kombination beider Parametergruppen trainiert. Für alle ML-Modelle lieferte ein RF (boosted trees Algorithmus) die jeweils besten Ergebnisse. Die 25 % Holdout-Validierung Genauigkeit ist Tabelle 8-10 zu entnehmen.

Tabelle 8-10: Klassifizierungsgenauigkeiten (25 % Holdout-Validierung) der jeweiligen Modelle zur konventionellen BF/PF Unterscheidung in LM-Aufnahmen.

Morphologie + Textur (26 Parameter)	Textur (21 Parameter)	Morphologie (5 Parameter)
76,72 %	76,72 %	65,82 %

⁸ Im Gegensatz zur k-fachen Kreuzvalidierung wird der Datensatz bei der Holdout nicht wiederholt aufgeteilt, sondern ein fester Teil des Datensatzes wird zur Validierung zurückgehalten (hier 25 %). Dies findet überwiegend bei großen Datensätzen Anwendung.

Die Referenz ist die Genauigkeit der pixelweisen EBSD-Klassifizierung (entspricht 100 %). Die höhere Genauigkeit der Bildtextur-Parameter zeigt, dass sie besser geeignet sind als die Morphologie. Eine Kombination der Bildtextur-Parameter mit der Morphologie bringt keine weitere Verbesserung. Die Genauigkeit von ca. 77 % über eine reine LM-Auswertung ist durchaus beachtenswert. Abbildung 8-18 zeigt die Klassifizierung ganzer LM-Aufnahmen basierend auf dem Modell aus Morphologie- und Bildtextur-Parametern, allerdings auch anhand perfekter Objektdefinition durch die korrelative EBSD-Kongruenzkarte. Dunkel hervorgehoben sind die Abweichungen von der EBSD-Referenz, hell die Übereinstimmungen. Die letztlichen Unterschiede in den Phasenanteilen sind in Tabelle 8-11 aufgeführt.

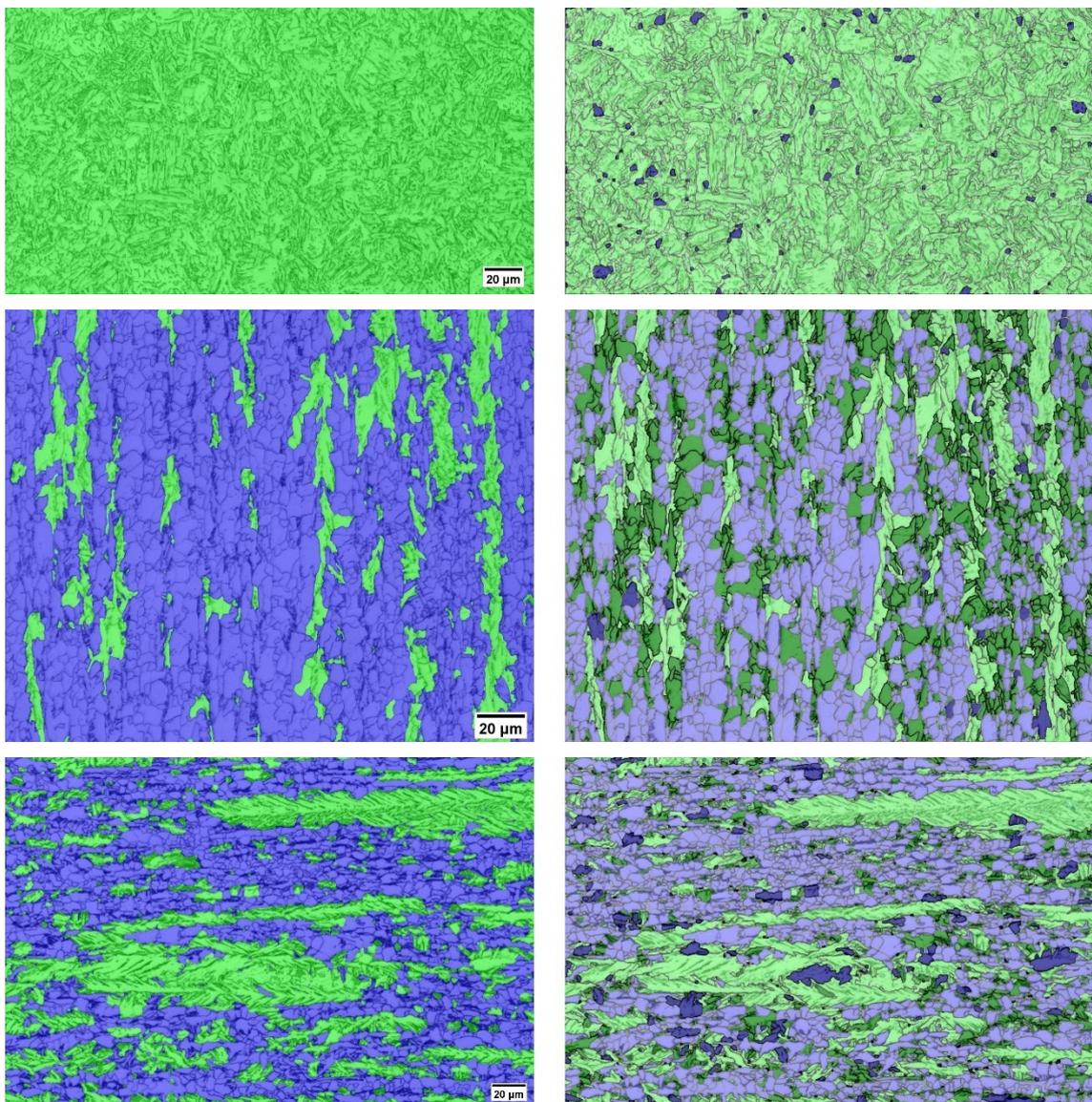


Abbildung 8-18: Links: Referenzen der EBSD-basierten pixelweisen BF/PF Klassifizierung. Rechts: korrespondierende Ergebnisse der konventionellen LM-Auswertung: Übereinstimmungen werden hell, Abweichungen dunkel dargestellt.

Tabelle 8-11: Abweichungen der Phasenanteile zwischen EBSD-basierter Referenz und konventioneller LM-Auswertung.

Probe	Anteil Bainitischer Ferrit [%]		
	EBSD-Referenz	LM-Auswertung	Abweichung
148	100	97,39	2,61
1053	18,66	46,34	27,72
M890 P1	40,53	40,41	0,12

Probe 148 wird überwiegend korrekt klassifiziert, da es sich um eine vollständig bainitisch umgewandelte Probe handelt und die Bereiche größtenteils eine klare Latten- oder Substruktur aufweisen. Bei den Proben 1053 und M890 kommt es zu stärkeren Abweichungen, die sich bei Probe M890 allerdings nicht in den Phasenanteilen widerspiegeln, da sich Fehlklassifizierungen von BF und PF gegenseitig aufheben. Generell werden insbesondere die großen Bereiche des lattenförmigen bainitischen Ferrits gut erfasst. Abweichungen treten in erster Linie an Stellen auf, an denen bainitische Bereiche durch Morphologie oder Bild-Textur (Substruktur oder C-reiche Zweitphase in den Objekten) nicht ganz genau zu erkennen sind. Zwar ist durch eine größere Datenmenge eine gewisse Verbesserung der Modelle zu erwarten, dennoch gilt zu bedenken, dass es sich bei diesen Ergebnissen durch die perfekte Objektdefinition gewissermaßen um ein „best-Case“ Szenario für die konventionelle LM-Auswertung handelt. Generell erfordert dieser Auswertungsansatz eine einwandfreie Segmentierung für eine korrekte Objektdefinition. Dies ist nicht immer gewährleistet bzw. erfordert eine signifikante manuelle Nachbearbeitung. Daher ist diese Auswertung potenziell fehleranfällig oder zeitintensiv. Der „metallographisch-metallurgisch“ motivierte objektweise Ansatz ist in diesem Fall, im Gegensatz zur objektweisen Klassifizierung der Zweiphasenstähle (Kapitel 7), nicht so gut geeignet.

Die Alternative zu diesem konventionellen Auswertungsansatz stellt die Segmentierung von bainitischem und polygonalem Ferrit mittels DL dar. In Kapitel 8.2 wurde bereits gezeigt, dass der lattenförmige Bainit in diesen Gefügen mittels DL genau segmentiert werden kann, sodass anzunehmen ist, dass auch eine Segmentierung des bainitischen Ferrits (lattenförmiger plus irregulärer bainitischer Ferrit) mit hinreichender Genauigkeit möglich ist. Über den korrelativen Ansatz könnten dafür über die etablierte pixelweise EBSD-Klassifizierung (8.3.2) automatisch qualitativ hochwertige Annotationen erzeugt werden. Dieser Datensatz würde das Training eines CNN ermöglichen, das in der Serienanwendung reine LM-Aufnahmen segmentiert. Zur Potenzialanalyse wurde mit lediglich vier LM-Aufnahmen und korrespondierenden Masken aus der EBSD-basierten Klassifizierung ein U-Net zum Segmentieren von bainitischem und polygonalem Ferrit in LM-Aufnahmen trainiert. Aus jeder LM-Aufnahme wurden dafür 256 x

256 px große Bildausschnitte erstellt und ein U-Net mit ResNet34 Backbone trainiert. Eine IoU von 69 % wurde erreicht. In Anbetracht der wenigen Trainingsdaten ist dieses Ergebnis sehr vielversprechend. Abbildung 8-19 zeigt Segmentierungsergebnisse, jeweils der originale LM-Bildausschnitt, die EBSD-basierte Grundwahrheit und die U-Net Vorhersage.

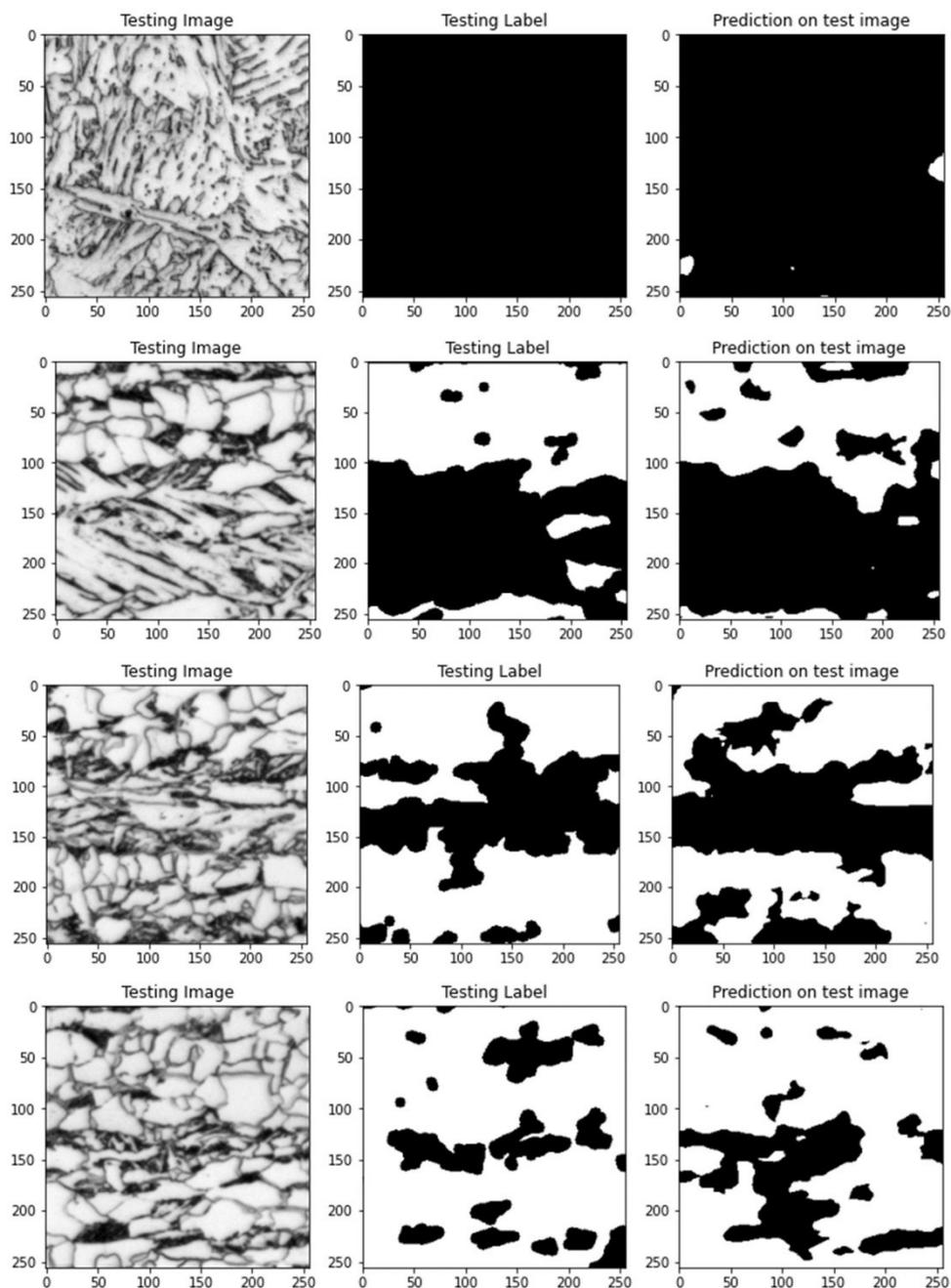


Abbildung 8-19: Ergebnisse der Vorversuche der DL-Segmentierung von BF und PF in LM-Aufnahmen. Links: Originale LM-Aufnahme. Mittig: EBSD-basierte Klassifizierung als Grundwahrheit für die DL-Segmentierung (gemäß 8.3.2, die Morphologie der Phasen erscheint etwas „rundlich“ durch die Binärbildnachbearbeitung (post-processing gemäß 8.3.2 und area-opening). Rechts: DL-Segmentierung.

Tendenziell werden die meisten bainitischen Bereiche erkannt. Es ist daher davon auszugehen, dass mit mehr Trainingsdaten, einer weiter verbesserten Grundwahrheit sowie Optimierungen beim Modell-Training eine hinreichend genaue Segmentierung möglich sein wird. Diese Untersuchung zeigt auch klar das Potenzial automatisierter EBSD-basierter Annotationen auf. Durch einen korrelativen Ansatz können durch die zusätzlichen, sensitiveren Methoden (hier: EBSD) Referenzen und diese Annotationen geschaffen werden, und die spätere Serienauswertung kann mit der einfachsten Methode erfolgen (hier: LM). In der Literatur findet sich bisher lediglich ein Anwendungsbeispiel. Shen et al. [152] generieren Annotationen zur Unterscheidung von Martensit und Restaustenit über die EBSD-Phasen-Karten sowie von Ferrit, Martensit und Restaustenit EBSD Phasen-Karten und Band Slope Karte. Dabei handelt es sich um relativ klar trennbare Gefügebestandteile, die EBSD-Daten ermöglichen aber auch anspruchsvollere Unterscheidungen, wie die hier erarbeitete Trennung von polygonalem, irregulärem bainitischem und lattenförmigem bainitischem Ferrit.

8.3.4 Zwischenfazit

Grundlage zur BF/PF-Unterscheidung in Gefügen von Multiphasenstählen bildet die korrelative Charakterisierung aus LM bzw. REM und EBSD. Mit Hilfe der in Kapitel 6 entwickelten Methodik sind die EBSD-Messdaten quantifizierbar und ermöglichen eine EBSD-basierte Unterscheidung der PF- und BF-Bereiche. Diese Unterscheidung kann in Form einer pixelweisen oder einer objektweisen Klassifizierung erfolgen. Die korrelativen LM/ REM Aufnahmen sind essenziell für eine korrekte Evaluierung dieser Klassifizierung. Das Modelltraining erfolgte iterativ, d.h. zunächst werden Referenzbereiche als Trainingsdaten ausgewählt. Das auf diesen Referenzbereichen basierende Modell wird auf neue Nicht-Referenz-Proben angewendet. Korrekt oder nicht korrekt klassifizierte Bereiche können in der Folge wiederum markiert und dem Modell als neue Trainingsdaten hinzugefügt werden. Durch diesen iterativen Prozess wird das Modell immer robuster und besser generalisierend. Der ML-Ansatz ist überdies robuster gegenüber Messeinstellungen und Messqualität als einfachere, Schwellwert-basierte Unterscheidungen aus der Literatur. Über den vorgestellten Ansatz ist außerdem eine weitere Trennung des bainitischen Ferrits in lattenförmige und irregulär Bereiche möglich.

Die EBSD-basierte Auswertung ermöglicht einen neuen Detailgrad der Gefügequantifizierung. Am Beispiel eines Regressionsmodells zur Vorhersage der mechanischen Eigenschaften anhand von Gefügeparametern konnte die Notwendigkeit und Relevanz der separaten Betrachtung und Quantifizierung der BF- und PF-Bereiche gezeigt werden. Weiterhin ist über den korrelativen Ansatz eine automatische Generierung von EBSD-basierten Annotationen realisierbar. Erste

Machbarkeitsstudien deuten darauf hin, dass eine Segmentierung von BF und PF in LM-Aufnahmen mittels DL, anhand dieser EBSD-basierten Annotationen, möglich ist.

9 Zusammenfassung und Ausblick

Methoden des maschinellen Lernens (ML) eröffnen vielfältige, neue Potenziale in der Gefügeanalyse. Einerseits lässt sich ML zum Automatisieren von vergleichsweise einfachen Fragestellungen nutzen, bei denen Zeitersparnis, Effizienzsteigerung oder die Entlastung der Experten von mühsamen, wiederkehrenden Aufgaben im Vordergrund stehen. Andererseits wird **die Auswertung komplexer Gefüge, für die keine konventionellen Herangehensweisen existieren, durch ML überhaupt erst ermöglicht**. Durch die immer komplexer werdenden Gefüge und Fragestellungen reicht es jedoch nicht mehr aus, lediglich Gefügaufnahmen in einen ML-Algorithmus einzuspeisen. Vielmehr ist eine ganzheitliche Betrachtung in einem materialwissenschaftlichen Kontext notwendig. Nur dann ist ML in der Lage, die oft versprochenen Vorteile der Objektivität und Reproduzierbarkeit tatsächlich zu liefern.

In der vorliegenden Arbeit wurde ein solch **ganzheitlicher Ansatz definiert** und erfolgreich auf die ML-Segmentierung und Klassifizierung komplexer bainitischer Gefüge angewendet. Diese ganzheitliche Betrachtung stellte nicht nur die Grundlage für diese beiden erfolgreichen ML-Implementierungen dar, sie kann auch die Basis für weitere, beliebige Anwendungen im Bereich der Forschung oder Qualitätskontrolle bilden. Die ML-basierte Auswertung soll alle Schritte hin zur Erzeugung einer Gefügaufnahme und in Bezug auf das ML speziell die Zuordnung der Grundwahrheit berücksichtigen. Durch den Fokus auf Kontrolle und Verständnis dieser Schritte, bspw. Probenkontrastierung und Bildaufnahme, lässt sich deren **Reproduzierbarkeit verbessern und Varianzen reduzieren**. Dadurch sind hochwertige Daten erzeugbar, wodurch sich **gute ML-Modelle auch mit wenig Trainingsdaten** generieren lassen. Die Zuordnung der Grundwahrheit ist der entscheidende Schritt des überwachten maschinellen Lernens. Je komplexer die Gefüge werden, desto schwieriger wird es jedoch, diese Grundwahrheit objektiv und reproduzierbar zuzuordnen. Dies ist insbesondere dann der Fall, wenn sich der menschliche Experte ausschließlich auf das visuelle Erscheinungsbild der Gefüge verlassen muss, welches von verschiedenen menschlichen Experten in unterschiedlicher Weise wahrgenommen werden kann. In der vorliegenden Arbeit wurde eine **Methodik zur korrelativen Charakterisierung mittels LM, REM und EBSD** entwickelt, die eine kombinierte Gefügequantifizierung aus Mikroskopaufnahmen und EBSD-Messdaten ermöglicht. Durch die korrelativen EBSD-Messungen ist die **objektive und reproduzierbare Zuordnung der Grundwahrheit überhaupt erst realisierbar**, die für die betrachtete Segmentierung und Klassifizierung bainitischer Gefüge in LM- oder REM-Aufnahmen erforderlich ist.

Der Aufwand der korrelativen Charakterisierung wird letztlich nur ein einziges Mal, nämlich bei der Generierung der Trainingsdaten, betrieben. Bei einer anschließenden Serienanwendung lässt

sich die Charakterisierung auf die einfachste Methode, im Idealfall das Lichtmikroskop, reduzieren. Letztlich ist davon auszugehen, dass die Kontrolle und das Verständnis der materialwissenschaftlichen Aspekte eine größere Hebelwirkung für den Erfolg des ML darstellen als die Optimierung der ML-Parameter.

Bei Gefügen von Multiphasenstählen wurde ML erfolgreich eingesetzt, um **lattenförmigen Bainit in LM- und REM-Aufnahmen zu segmentieren** und um eine robustere **Klassifizierung von bainitischem und polygonalem Ferrit anhand von EBSD-Daten** zu erzielen, die sich perspektivisch auf eine reine LM-Auswertung übertragen lässt. Bei Zweiphasenstählen wird mittels ML die **C-reiche Zweitphase erfolgreich klassifiziert**, wobei erstmals auch **bainitische Unterklassen berücksichtigt** werden. Für diese Aufgaben existierten zuvor noch keine zufriedenstellenden Ansätze.

Bei all diesen ML-basierten Auswertungen stellte die ganzheitliche Betrachtung und die korrelative Charakterisierung die Erfolgsgrundlage dar. Diese automatisierten objektiven und reproduzierbaren Auswertungen erreichen einen bisher nicht zugänglichen Detail- und Differenzierungsgrad, wodurch sie sich von anderen in der Literatur beschriebenen Ansätzen abheben. Die Auswertungen bilden damit die **Grundlage für eine verbesserte, fortschrittlichere Gefügequantifizierung**, die wiederum das Aufstellen neuer Prozess-Gefüge-Eigenschaftskorrelationen ermöglichen und damit die Basis für weitere gefügebasierte Werkstoffentwicklungen darstellen.

Während die Segmentierung der Multiphasenstählen mittels DL erreicht wurde, kam zur Klassifizierung der Zweiphasenstähle konventionelles ML zum Einsatz. Dies zeigt, dass trotz des aktuellen Hypes um DL auch konventionelles ML weiterhin erfolgsversprechend ist. Generell fehlt bisher noch ein Erkenntnis, welcher ML-Ansatz oder welche Merkmale für welche Fragestellungen am besten geeignet sind oder wo sie an ihre Grenzen stoßen. In Anbetracht vielfältiger Merkmalsextraktionsprozesse, die über die in dieser Arbeit verwendeten Parameter hinausgehen (local ternary pattern, bag of visual words, 2-points-statistics, vortrainierte CNN) sind systematische Studien dazu praktisch nur in institutsübergreifender Zusammenarbeit möglich, in die verschiedene Gruppen ihre jeweiligen Herangehensweisen einbringen. An dieser Stelle ist es empfehlenswert, auch die Entwicklungen der Informatik in Richtung „explainable AI“ zu verfolgen. Dadurch ließe sich eine höhere Akzeptanz des ML in der Materialwissenschaft erreichen.

Alle in dieser Arbeit verwendeten Ansätze lassen sich prinzipiell auf andere Gefüge und Fragestellungen übertragen. Dies wird in einem anschließenden Promotionsvorhaben im Rahmen der strategischen Partnerschaft zwischen Dillinger und MECS erfolgen. Nachdem der Fokus bisher auf Zweiphasen- und Multiphasenstählen lag, werden bei diesem Vorhaben nun Vergütungsstähle berücksichtigt, die durch ihre sehr feinen Gefügebestandteile die Komplexität weiter erhöhen. Auch in diesem Rahmen wird insbesondere der korrelativen Charakterisierung als Ausgangspunkt für die erfolgreiche Implementierung ML-basierter Auswertungen entscheidende Bedeutung zukommen. Außerdem werden Methoden des unüberwachten ML, die im Rahmen der vorliegenden Arbeit lediglich angeschnitten wurden, zum Einsatz kommen, um bestehende Klasseneinteilungen zu überprüfen und ggfs. neue Klassen zu definieren und damit zu einer Objektivierung der Bainit-Kontroverse beizutragen.

Hinsichtlich der Grundwahrheit sind nicht nur Objektivität und Reproduzierbarkeit als kritische Parameter zu sehen, generell ist die Datenerzeugung inklusive der Zuordnung der Grundwahrheit zeit- und kostenintensiv. Die Zuordnung der Grundwahrheit stellt dabei oft den Flaschenhals dar. In der vorliegenden Arbeit wurden die korrelativen EBSD-Daten überwiegend qualitativ und manuell zur Zuordnung der Grundwahrheit verwendet. Es wurde jedoch auch gezeigt, dass automatisierte EBSD-basierte Annotationen generierbar sind. Die korrelative Mikroskopie lässt sich entsprechend zur Verbesserung der Grundwahrheit und zur Entlastung der Experten von mühsamen Annotationen einsetzen, was jedoch mit einem erhöhten experimentellen Aufwand einhergeht. Daher erscheint es vielversprechend, die verbesserte, jedoch aufwendigere Generierung der Grundwahrheit mit Ansätzen aus der Informatik zum Trainieren von ML-Modellen mit weniger Trainingsdaten zu kombinieren, wie dem sog. „one-shot learning“ [241], „weakly-supervised learning“ [242], sog. „physics-constrained DL models“ [243] oder der „unsupervised domain adaptation“ [237]. In diesem Kontext ist auch die Erzeugung synthetischer Trainingsdaten zu nennen, wobei ein generelles Verständnis hinsichtlich Methoden, Möglichkeiten und Grenzen von synthetischen Daten im Bereich der Gefügeanalyse bisher noch fehlt.

10 Anhang

10.1 Klassifizierungsschemata Stahl und Bainit

Vor der Vorstellung der Klassifizierungsschemata muss zunächst die Nutzung und Bedeutung des englischen Begriffes „acicular“ abgegrenzt werden. Bei bainitischen Gefügen taucht die Bezeichnung im englischen oft auf, die im deutschen mit „azikular“ bzw. nadelförmig übersetzt werden kann. Diese beiden Bezeichnungen werden im deutschen oft auch synonym verwendet. Jedoch ist der sog. „azikulare Ferrit“ ein Sonderfall eines Schweißgutgefüges, beim dem Ferritnadeln an Einschlüssen innerhalb der ehemaligen Austenitkörner nukleieren und dann ein Gefüge im Aussehen eines „Korbgeflechts“ bilden. Daher wird der englische Begriff „acicular“ in dieser Arbeit mit nadelförmig übersetzt, solange die Form des Ferrits und nicht das Schweißgutgefüge gemeint ist. Wird auch im deutschen die Bezeichnung „azikular“ verwendet, wird sich damit explizit auf das Schweißgutgefüge bezogen.

Die folgenden Beschreibungen zur historischen Entwicklung der Begriffe der bainitischen Gefüge orientieren sich an „Bhadeshia: Bainite in Steels“ ([17], S. 2f). Als die ersten bainitischen Gefüge 1930 von Davenport und Bain entdeckt wurden, bezeichneten sie diese als „nadelförmiges, dunkel geätztes Aggregat, das deutlich anders war als Perlit oder Martensit, die im selben Stahl beobachtet wurden“. Ursprünglich nannten sie diese Gefüge „Martensit-Troostit“. Bereits damals wurden Unterschiede in den Strukturen in Abhängigkeit einer hohen bzw. niedrigen Bildungstemperatur festgestellt. 1934 wurden diese Gefüge, in Anlehnung an Laborleiter Bain, erstmals als Bainit bezeichnet. Weitere Bezeichnungen waren ein „unbenanntes, dunkel geätztes, nadelförmiges Aggregat, das dem Martensit ähnlich ist“, eine „schnell anätzende, nadelförmige Struktur“ sowie „Austempering Structures“. 1939 stellte Bain fest, dass bainitische Gefüge bei derselben Härte zäher sind als martensitische. Ebenfalls 1939 verwendete Mehl für die bei hoher bzw. niedriger Umwandlungstemperatur geformten Strukturen erstmals die Begriffe oberer und unterer Bainit. Diese sind sowohl die ältesten als auch die heute bekanntesten und anerkanntesten Begriffe. Die folgende, 1969 von Aaronson eingeführte Beschreibung wird heute noch weitestgehend als mikrostrukturelle Definition von Bainit angesehen. Bei Bainit handele es sich um „ein nicht-lamellares Zweiphasengemenge aus Ferrit und Karbiden, bei dem sich die Phasen nacheinander bilden (im Gegensatz zu Perlit, bei dem sie sich kooperativ bilden)“ [19].

Die kontinuierliche Weiterentwicklung von Legierungskonzepten und Verarbeitungsprozessen hat zu einer immer größeren Vielfalt und Komplexität an bainitischen Strukturen geführt, sodass die einfachen ersten Klassifizierungsschemata wie oberer und unterer Bainit nicht mehr ausreichen. Entscheidend dazu beigetragen hat auch, dass viele bainitische Gefüge durch eine kontinuierliche Abkühlung anstelle isothermer Transformation entstehen [20]. Diese Vielfalt

spiegelt sich in der Uneinigkeit der Experten in der Benennung und Klassifizierung dieser Gefüge wider, sowie in der nicht konsistenten Beschreibung in der Literatur. Dementsprechend wurde bereits eine Vielzahl an Klassifizierungsschemata vorgeschlagen. Die relevantesten werden in chronologischer Reihenfolge vorgestellt.

Ohmori (1971)

Ohmori et al. [26] unterscheiden den Bainit in niedrig C-haltigen HSLA-Stählen nach LM und TEM Untersuchungen in drei Arten, BI, II und III.

Tabelle 10-1: Klassifizierungsschema nach Ohmori et al. [26].

Gefüge	Umwandlungsbereich	Beschreibung
Bainit I	600-500 °C	Karbidfreier, nadelförmiger Ferrit mit M/A-Filmen auf den Latten-Grenzen
Bainit II	500-450 °C	Karbidfreier, nadelförmiger Ferrit mit Zementit auf den Latten-Grenzen
Bainit III	450°C - M_s	Nadelförmiger Ferrit mit kleinen Zementitplättchen innerhalb der Latten

BII entspricht hierbei dem klassischen oberen Bainit. BIII hat zwar ein Erscheinungsbild wie klassischer unterer Bainit in höher C-haltigen Stählen. Allerdings ist BIII wie auch BI und BII lattenförmig und nicht plattenförmig wie der untere Bainit in höher C-haltigen Stählen. Daher werden letztlich alle drei definierten Bainitarten dem Typ oberer Bainit zugeordnet.

Bramfitt & Speer (1990)

Da industrielle bainitische Stähle überwiegend kontinuierlich abgekühlt werden, schlagen Bramfitt et al. [20] ein Schema vor, das neben bainitischen Gefügen aus isothermer Umwandlung auch die nach kontinuierlicher Abkühlung abdeckt/berücksichtigt. Da die Bezeichnungen oberer und unterer Bainit ursprünglich zur Beschreibung isotherm umgewandelter Gefüge definiert wurden, wären sie zur Beschreibung kontinuierlich abgekühlter Gefüge weniger relevant und teilweise sogar irreführend.

Allen mittels TEM und LM beobachteten Bainitarten ist gemein, dass sie das Ergebnis des Wachstums einer nadelförmigen Ferritphase in Verbindung mit einer zweiten Phase, die aus Karbiden, Martensit und/oder Austenit sowie Perlit bestehen kann, sind. Die Ausprägung dieser zweiten Phase ist abhängig von der Kohlenstoff-Übersättigung im Austenit, der Kinetik der Kohlenstoffdiffusion und der Stahlzusammensetzung

Letztlich berücksichtigt das vorgeschlagene Schema drei Bainitarten. Alle bestehen aus nadelförmigem Ferrit. Bei der ersten Art (B1) befinden sich die Ausscheidungen (Zementit, ϵ -Karbide) innerhalb der Latten, bei der zweiten (B2) befinden sie sich Partikel bzw. Filme

(Zementit, Austenit, Martensit) zwischen den Latten. Bei der dritten Art (B3) liegen die zweite Phase Bereiche (Austenit, Martensit, Perlit) als diskrete Inseln im nadelförmigen Ferrit vor. Weiterhin wird angemerkt, dass Mikroskopaufnahmen häufig eine Kombination mehrerer Bainitarten enthalten.

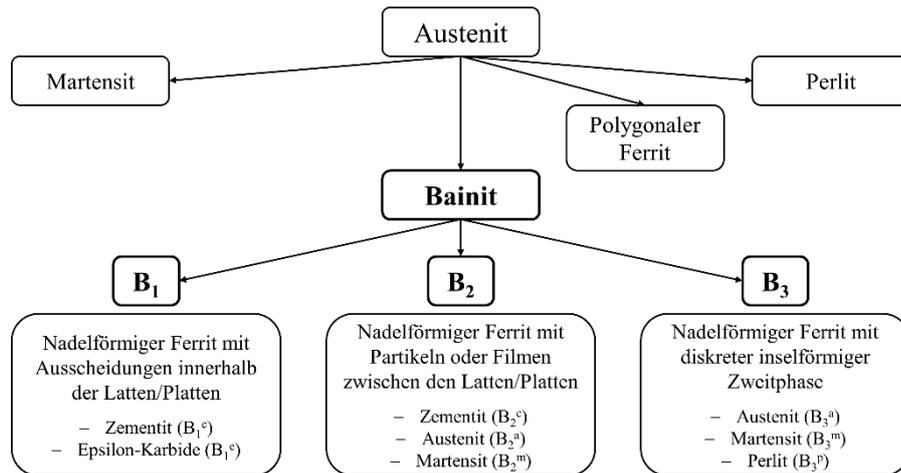


Abbildung 10-1: Klassifizierungsschema nach Bramfitt et al., modifiziert nach [20].

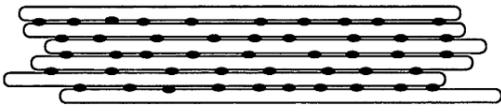
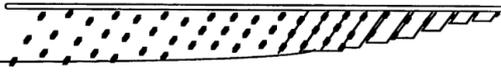
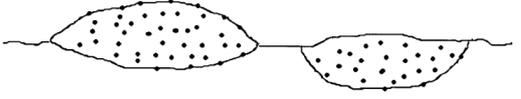
Reynolds & Aaronson (1991)

Reynolds et al. [27] definieren die in Tabelle 10-2 aufgelisteten sechs Bainittypen. Deren Morphologien resultieren daraus, in welchem Grad sich die beiden Produkt-Phasen Ferrit und Zementit bei Nukleation sowie Wachstum ins Austenitgebiet unterstützen bzw. behindern.

Tabelle 10-2: Klassifizierungsschema nach Reynolds et al. [27].

Bainitart	Morphologie	Beschreibung
Nodularer Bainit		In etwa gleicher Einfluss von Ferrit und Zementit Große, zusammenhängende Matrixbereiche werden benötigt
Säulenförmiger Bainit		Modifikation des nodularen Bainits

Fortsetzung von Tabelle 10-2

Oberer Bainit		Zweite Phase zwischen Ferrit Latten/ Platten Morphologie durch proeutektoiden Ferrit bestimmt
Unterer Bainit		Zweite Phase innerhalb der Ferrit Latten/ Platten, ausgerichtet in 55-60 ° Winkel
Allotriomorpher Korngrenzen-Bainit		Nicht kooperative Bildung von Karbiden und Korngrenzen Ferrit-Allotriomorphen Morphologie durch proeutektoiden Ferrit-Allotriomorphe bestimmt
Inverser Bainit		Inverser Bainit nach Bildung von bspw. Korngrenzen-Zementit Morphologie durch proeutektoiden Zementit-Allotriomorphe bestimmt

ISIJ (1992)

Im Gegensatz zu den vorherigen Schemata, bei denen letztlich eine einzelne finale Bainit Bezeichnung definiert wurde, auch wenn die ferritische und C-reiche Zweitphase getrennt beschrieben wurden, werden im Schema des Bainit Komitees des Japanischen Eisen und Stahl Institutes (engl. Bainite Committee of the Japanese Iron and Steel Institute) ferritische Phase und C-reiche Zweitphase getrennt klassifiziert [28,170].

Tabelle 10-3: Klassifizierungsschema nach ISIJ für die ferritische Phase, modifiziert nach [170].

Symbol	Bezeichnung	Beschreibung
α_p	Polygonaler Ferrit	gleichachsige, polyedrische Form, überwiegend rekristallisiert
α_q	Quasi-polygonaler Ferrit	irreguläre, wechselnde Form, überwiegend erholt
α_w	Widmanstätten-Ferrit	latten-/plattenartige Form, größtenteils erholt, nicht in sehr niedrig-C-haltigen Stählen
α_B	Granularer Bainit	granular bainitisch ferritische Struktur; Versetzungs-Substruktur, aber teilweise erholt
α^0_B	Bainitischer Ferrit	bündelartig, mit Latten, keine Karbide, ehemalige γ -Korngrenzen noch sichtbar, Versetzungs-Substruktur
α'_m	Versetzungsreicher kubischer Martensit	Latten-Martensit

Tabelle 10-4: Klassifizierungsschema nach ISIJ für die C-reiche Zweitphase, modifiziert nach [170].

Symbol	Bezeichnung	Beschreibung
γ_r	Restaustenit	Hoher C-Gehalt, oft filmartig
M/A	Martensit/ Austenit Bestandteil	-
α^*M	Martensit	Lattenmartensit bei mittlerem C-Gehalt, Zwillingsmartensit bei hohem C-Gehalt
α^{TM}	Selbstangellener Martensit	-
B	B _{II} , B ₂ : oberer Bainit B _U : oberer Bainit B _L : unterer Bainit	-
P'	Degenerierter Perlit	-
P	Perlit	Eutektoides Reaktionsprodukt
⊖	Zementit Partikel	Ausscheidungen

Lotter & Hougardy (1992)

Lotter et al. [29] unterteilen die in LM-Aufnahmen betrachteten bainitischen Gefüge in feinnadeligen, grobnadeligen und körnigen Bainit. Es wird angemerkt, dass im LM i.d.R. keine Unterscheidung zwischen oberem und unterem Bainit möglich ist.

Tabelle 10-5: Klassifizierungsschema nach Lotter et al. [29].

Feinnadeliger Bainit	Bainitischer Ferrit in Form langgestreckter Lanzetten, die gruppenweise parallel laufen; Breite der Ferritlatten/platten qualitativ als fein bezeichnet; Kohlenstoffreiche Phase zwischen oder innerhalb der Latten/Platten
Grobnadeliger Bainit	Bainitischer Ferrit in Form langgestreckter Lanzetten, die gruppenweise parallel laufen; Breite der Ferritlatten/platten qualitativ als grob bezeichnet; Kohlenstoffreiche Phase zwischen oder innerhalb der Latten/Platten
Körniger Bainit	Kohlenstoffreiche Phase inselförmig in einer Matrix aus bainitischem Ferrit

Krauss & Thompson (1995)

Krauss et al. [30] widmen sich einer ausführlichen Beschreibung der Ferritarten, wie sie in niedrig C-haltigen Stählen auftreten, analog zur Definition der Ferritarten im ISIJ-Schema (Tabelle 10-3).

Tabelle 10-6: Klassifizierungsschema nach Krauss et al. [30].

Ferritart	Beschreibung
Polygonaler oder gleichachsiger Ferrit (PF)	gleichachsige Körner Bildet sich als Korngrenzen-Allotriomorph Bildung bei höchsten Umwandlungstemperaturen/ geringsten Abkühlraten geringe Versetzungsdichte, keine Substruktur glatte, kontinuierliche Korngrenzen

Fortsetzung von Tabelle 10-6

Widmanstätten Ferrit	Grobe, gestreckte Körner Latten/plattenförmig (hohes Aspektverhältnis) Bildung an Austenit-Korngrenzen oder PF-Allotriomorphen geringe Versetzungsdichte, kaum oder keine Substruktur
Quasi-polygonaler oder massiver Ferrit	Bei sehr niedrigen C-Gehalten und schneller Abkühlung Bildet sich als einphasiger Ferrit aus dem einphasigen Austenit ohne Veränderung der Zusammensetzung hohe Versetzungsdichte, Versetzungssubstrukturen vereinzelt M/A gezackte Korngrenzen
Bainitischer oder nadelförmiger Ferrit	Mittlerer Temperaturbereich in Bezug auf ZTU-Diagramm feinere Strukturen als vorherige Ferritarten ehemalige Austenit-Kornstruktur bleibt Struktur erhalten feine, längliche Ferritkörner parallele Anordnung hohe Versetzungsdichte meistens M/A als Zweitphase, länglich zwischen den Ferritlatten Lattengrenzen sind Kleinwinkelkorngrenzen
Granularer Ferrit oder granularer bainitischer Ferrit	Selber Temperaturbereich wie nadelförmiger Ferrit, aber bei etwas niedrigerer Abkühlung Viele Gemeinsamkeiten mit nadelförmigem Ferrit Unterschied: Granulare, gleichachsige Form der Ferritkörner und M/As

Thewlis (2004)

Thewlis et al. [31] adaptieren das Klassifizierungsschema für Schweißgefüge des International Institute for Welding (IIW) für nicht geschweißte Gefüge. Dieses Schema soll eine Gefüge-Klassifizierung von unlegierten und niedrig legierten Stählen (bis 0,8 % C und bis zu 5 % Legierungselemente) sowie deren Schweißgut- und WEZ-Gefüge anhand von LM-Aufnahmen ermöglichen. Als Hauptklassen werden Ferrit, Perlit, Widmannstättenferrit, Bainit und Martensit betrachtet. Innerhalb jeder Klasse gibt es weitere Abstufungen. Zusätzlich wird ein Flussdiagramm als Leitfaden zur Klassifizierung definiert.

Tabelle 10-7: Klassifizierungsschema nach Thewlis et al. [31].

Hauptstruktur				Beschreibung
	Gesamt	Haupt-	Sub-	
Rekonstruktive Phasenumwandlung: diffusionsgesteuert, kleine Reaktionsrate				
Ferrit	PF	PF(GB)	PF(G)	Polygonaler Korngrenzen-Ferrit (grain boundary), Allotriomorpher Ferrit, Polygonaler Ferrit, „Ferritadern“
			PF(NA)	Nicht ausgerichteter polygonaler Ferrit
		PF(I)	PF(I)	Idiomorpher Ferrit

Fortsetzung von Tabelle 10-7				
Perlit	P	P	FC(P)	Lamellarer Perlit Degenerierter Perlit Perlit mit kleinen Kolonien (Fine Colonies)
			FC	Ferrit-Karbid-Gemenge (Ferrite-Carbide)
Displazive Phasenumwandlung: hohe Reaktionsrate				
Widmannstätten Ferrit	WF	WF (GB)	FS(A)	Widmanstätten Ferrit „Side-Plates“ mit ausgerichteter Mikrophase
			FS(NA)	Widmanstätten Ferrit „Side-Plates“ mit nicht ausgerichteter Mikrophase
		WF (I)	FS(I)	Intragranulare Widmanstätten Ferrit „Side-Plates“ Bildung an intragranularen Einschlüssen
			FP(I)	Intragranulare Widmanstätten Ferrit-Platten Bildung an intragranularen Einschlüssen
			AF	Azikularer Widmanstätten Ferrit Bildung an intragranularen Einschlüssen
Bainit	B	B (GB)	FS(A)	Bainitische Ferrit Bündel (Sheaves) mit ausgerichteten Karbiden
			FS(NA)	Bainitische Ferrit Bündel (Sheaves) mit nicht ausgerichteten Karbiden
			FS(UB)	Oberer (Upper) Bainit Karbide zwischen den Bainitbereichen
			FS(LB)	Unter (Lower) Bainit Karbide innerhalb der Bainitbereiche
		B (I)	FS(I)	Intragranulare bainitische Ferrit Bündel (Sheaves) Bildung an intragranularen Einschlüssen
			FP(I)	Intragranulare bainitische Ferrit Platten Bildung an intragranularen Einschlüssen
			AF	Azikularer bainitischer Ferrit Feine, verflochtete Struktur Bildung an intragranularen Einschlüssen
Martensit	M	M	M(L)	Latten-Martensit Niedriger C-Gehalt
			M(T)	Zwillings (Twin)-Martensit Hoher C-Gehalt

Zajac (2005)

In einem auf REM-Aufnahmen beruhenden Schema schlagen Zajac et al. [10] fünf verschiedene Bainitarten vor. Betrachtete Stähle sind niedrig legierte, hochfeste Linepipe Güten mit überwiegend bainitischen Gefügen.

Charakteristisches Merkmal des granularen Bainits ist das Fehlen von Karbiden. Stattdessen partitioniert der Kohlenstoff, der während der Bildung des bainitischen Ferrits frei wird, in den restlichen Austenit. Aus diesem C-angereicherten Austenit können verschiedene Umwandlungsprodukte entstehen.

Tabelle 10-8: Bainitarten gemäß Schema nach Zajac [10].

Bainitart	Beschreibung	Skizze
Degenerierter oberer Bainit	Lattenförmiger Ferrit mit M/A auf den Lattengrenzen	
Oberer Bainit	Lattenförmiger Ferrit mit Zementit-Ausscheidungen auf den Lattengrenzen	
Degenerierter unterer Bainit	Lattenförmiger Ferrit mit M/A innerhalb der Latten	
Unterer Bainit	Lattenförmiger Ferrit mit Zementit-Ausscheidungen innerhalb der Latten	
Granularer Bainit	Irreguläre Ferritkörner mit dazwischen verteilter C-reicher Zweitphase Körner zeigen irreguläre Korngrenzen und Substruktur Keine Karbide, stattdessen C-angereicherter Austenit, aus der verschiedene Umwandlungsprodukte entstehen können	

Tabelle 10-9: Umwandlungsprodukte im granularen Bainit gemäß Schema nach Zajac [10].

Zweitphase im granularen Bainit	Beschreibung
Degenerierter Perlit	Wenn bei hohen Temperaturen noch ein kooperatives Wachstum von Ferrit und Zementit möglich ist, können sich kleine „Knollen“ von degeneriertem Perlit bilden
„Zementit-Bruchstücke“ (engl. Debris of Cementite)	Chaotisches Gemenge aus Ferrit und Zementit, sowohl im Korninneren als auch an Korngrenzen
Bainit	Bei höheren Abkühlraten Mit Zementit oder M/A Ausscheidungen

Fortsetzung von Tabelle 10-9

Produkte unvollständiger Umwandlung (engl. „mixture of incomplete transformation products“)	Bestehen aus fragmentierten Ferrit-, Zementit- und M/A-Bruchstücken, die sich bilden, wenn der Austenit zerfällt aufgrund von Legierungselementen, die die Ferritwachstumsraten verringern, aufhört, so dass sich der Restaustenit in ein ungewöhnliches Gefüge umwandelt Treten auf als separate Körner, in Kornwickeln irregulären Ferrits oder als Teil großer irregulärer Ferritkörner
Martensit/ Austenit Bestandteile	Von vollständig austenitisch bis vollständig martensitisch

Ein weiterer Gefügebestandteil, der in diesen niedrig C-haltigen Stählen auftritt, ist Latten-Martensit, der in diesen Stählen immer selbst-angelassen ist. Die Morphologie ähnelt der des unteren Bainits, nur dass die Karbid-Ausscheidungen hier regellos verteilt sind, im Gegensatz zur Vorzugsausrichtung im unteren Bainit.

Zusätzlich zur Klassifizierung auf REM-Basis definieren Zajac et al. [10,23] auch eine EBSD-basierte Klassifizierung von unterem, oberem und granularem Bainit. Ausschlaggebend ist die Verteilung der Missorientierungswinkel.

Tabelle 10-10: EBSD-basierte Klassifizierung von unterem, oberem und granularem Bainit gemäß Schema nach Zajac [10,23].

Bainitart	EBSD-Charakteristika	Missorientierungsverteilung
Unterer Bainit	Hoher Anteil an Missorientierungen im Winkelbereich 50-60 ° Geringer Anteil an Missorientierungen < 20 °.	
Oberer Bainit	Hoher Anteil an Missorientierungen < 20 ° Geringer Anteil an Missorientierungen > 50 °	
Granularer Bainit	Weitestgehend zufällige Missorientierungswinkelverteilung mit einem breiten Peak im Bereich 45 ° Durch Substrukturen kleiner Peak bei Missorientierungen < 20 °	

Smirnov (2010)

Auch Smirnov et al. [32] betrachten niedrig C-haltige Linepipe-Stähle und berücksichtigen in ihrem Schema die für diese Güten relevanten Gefügebestandteile. Einteilungskriterien sind die Art der Phasenumwandlung (diffusionsgesteuert oder displaziv) sowie die Morphologie der Phasen. Dem vorgestellten Schema liegen LM- und TEM-Aufnahmen zugrunde.

Tabelle 10-11: Klassifizierungsschema nach Smirnov et al. [32].

Umwandlungsart	Gefüge	Beschreibung
Diffusion	Polygonaler (gleichachsisger) Ferrit	Diffusionsgesteuert bei hohen Temperaturen und niedriger Abkühlrate Polyedrische Körner mit glatten Korngrenzen Geringe Versetzungsdichte, keine Substruktur
	Allotriomorpher (Korngrenzen-) Ferrit	Niedrige Bildungstemperatur als polygonaler Ferrit Durchgehendes oder unterbrochenes Ferritnetzwerk an den Grenzen der Austenitkörner Geringe Versetzungsdichte
Diffusion	Quasi-polygonaler Ferrit	Niedrige Bildungstemperatur als polygonaler Ferrit Hohe Versetzungsdichte, kann Substruktur aufweisen
	Lamellarer Perlit	Kolonien aus abwechselnden Ferrit- und Zementitplätzen In Form von schmalen Bereichen und an Ferritkorngrenzen
	Degenerierter Perlit	Keine klare abwechselnde Ferrit-Zementit-Struktur mehr Stattdessen variierende Dicke, Krümmung oder auch Einförmigkeit der Zementitbestandteile oder unterbrochene Anordnung
	Widmannstätten Ferrit	Niedrige Bildungstemperatur und höhere Abkühlrate als polygonaler Ferrit Grobe, gestreckte Platten entlang der Austenitkorngrenzen Größere Struktur und niedrigere Versetzungsdichte als azikularer Bainit
Displaziv	Azikularer Bainit	Ausgedehnte Ferritkristalle, Inseln von Zweitphasen Bildung an nichtmetallischen Einschlüssen Hohe Versetzungsdichte, Großwinkel-Korngrenzen zwischen den Kristallen
	Lattenförmiger Bainit	Dünne, lange Latten, typischerweise Restaustenit auf den Lattengrenzen Mehrere Latten formen grobe Pakete
	Globularer (körniger) Bainit	Relativ gleichachsige Ferritkörner mit Inseln aus Restaustenit, Martensit oder M/A Hohe Versetzungsdichte, Ferritkörner durch Kleinwinkelkorngrenzen getrennt

Fortsetzung von Tabelle 10-11

Displaziv	Latten-Martensit	Hohe Abkühlrate Niedriger C-Gehalt Ähnliche Morphologie zu lattenförmigem Bainit, aber feinere Strukturen und höhere Versetzungsdichte Auch als Bestandteil von M/A Kann auch selbstangelassen vorliegen
	Zwillingsmartensit	Bildung aus C-angereichertem Austenit

Gerdemann & Song (2010, 2014)

Im Schema von Gerdemann [12], welches später von Song [24] um bestimmte Karbidarten erweitert wurde, werden die Ferrit-Phase und die C-reiche Zweitphase wiederum getrennt beschrieben. Die Ferrit-Phase wird durch ihre Kristallstruktur (immer kubisch raumzentriert) und ihre Morphologie beschrieben, die Zweitphasen durch Ort, Kristallstruktur und Morphologie. Jeder Beschreibung wird ein bestimmter Buchstabe zur Abkürzung entnommen (fett formatierte Buchstaben in Tabelle 10-12), sodass sich letztlich ein Buchstabencode als Beschreibung bzw. Klassifizierung des Gefüges ergibt. Zur Wiedergabe der korrekten Codes wurden die englischen Begriffe des Schemas übernommen.

Tabelle 10-12: Klassifizierungsschema nach Gerdemann und Song [12,24].

Hauptphase (Primary phase)		Zweite Phase (Secondary phase)		
Kristallstruktur	Morphologie	Ort	Kristallstruktur	Morphologie
BCC (Ferrit)	Polygonal	Inter-granular (B oundary)	Alloyed Carbides	R ound
	Quasi-Polygonal	Intra-granular	bct (M artensite)	E longated
	Granular		fcc (A ustenite)	L ath-like
	Widmanstätten		Keine (N one)	P late-like
	Acicular		θ -Karbide	F ilm-like
	Lath-like		ε -Karbide	C lustered
	Plate-like		η -Karbide	
			C lusters	

So wird bspw. ein Gefüge mit einer Hauptphase aus lattenförmigem (L) Ferrit (B) und einer auf (B) den Ferritlatten ausgeschiedenen Zweitphase aus filmartigem (F) Austenit (A) zu: P: B-L; S: B-A-F.

Micro-quant (2011)

Das Micro-quant Projekt (Microstructural quantification of multi-phase steels, Aarnts et al. [3]) nimmt eine besondere Stellung ein, da es sich um ein vorwettbewerbliches, EU-gefördertes Projekt mit mehreren Stahlherstellern und Forschungseinrichtungen handelt. Dementsprechend stellen die verwendeten Ansätze und das vorgestellte Schema keine „Insellösung“ dar, sondern

bilden einen gewissen Konsens ab. Tabelle 10-13 zeigt das Klassifizierungsschema für Multiphasenstähle. Ähnlich zum ISIJ- oder Gerdemann-Schema werden Matrixphase und zweite Phase getrennt klassifiziert. Zusätzlich werden ausscheidungshärtende Karbide berücksichtigt.

Tabelle 10-13: Klassifizierungsschema für Multiphasenstähle des Micro-quant, gemäß [3] (Tabelle 2.6).

Matrix	Zweite Phase				
	Verteilung	Form	Typ	Typ	Dichte
<ul style="list-style-type: none"> - Polygonaler Ferrit - Quasi-polygonaler Ferrit - Massiver Ferrit - Perlit - Widmanstätten-Ferit - Azikularer Ferrit - Granularer bainitischer Ferrit - Lattenförmiger bainitischer Ferrit - Latten-Martensit - Platten-Martensit - Deformierter Ferrit 	<ul style="list-style-type: none"> - Keine Zweitphase - Zwischen den Körnern/Latten - Innerhalb der Körner/Latten 	<ul style="list-style-type: none"> - Runde Partikel - Gestreckte Partikel - Filme - Diskrete Inseln - Körner - Blockartige Bereiche 	<ul style="list-style-type: none"> - ε-Karbide - Zementit - Lamellarer Perlit - Degenerierter Perlit - Restaustenit - Martensit/ Austenit Bestandteil - Produkte unvollständiger Umwandlung - Karbidfreier Bainit - Oberer Bainit - Degenerierter oberer Bainit - Unterer Bainit - Degenerierter unterer Bainit - Strukturloser Martensit - Strukturierter Martensit - (selbst-) angelassener Martensit 	<ul style="list-style-type: none"> - Keine M(C,N) - ε-Cu - Mo₂C 	<ul style="list-style-type: none"> - Gering - Hoch - Sehr hoch

Darüber hinaus werden für eine Klassifizierung relevante Charakteristika (morphologisch, kristallographisch) dieser Gefügebestandteile, wie sie mit LM/REM oder EBSD zugänglich sind, aufgelistet.

Tabelle 10-14: morphologische und kristallographische Charakteristika der ferritischen Phase [3] (Tabelle 2.2).

Matrix	Symbol	Morphologisch (LM, REM)	Kristallographisch (EBSD)	Bemerkungen
Rekonstruktive Phasenumwandlung				
Ferrit	Polygonal	α_F	Gleichachsig, polyedrische Form ehemalige γ -Korngrenzen überschreitend	Keine Substruktur, geringe Versetzungsdichte IQ hoch, KAM niedrig

Fortsetzung von Tabelle 10-14

Ferrit	Quasi-polygonal	α_Q	Irreguläre, wechselhafte Form ehemalige γ -Korngrenzen überschreitend	Überwiegend erholt mit Substruktur IQ hoch, KAM mittelhoch	Entstehung bei niedrigeren Temperaturen als α_P
	Massiv	α_M	Große Ferritkörner in sehr C-armen Stählen selbe Zusammensetzung wie γ -Phase, aus der α_M entstanden ist	Kann hohe Versetzungsdichte und sub-Korngrenzen aufweisen	Keine C-Partitionierung, kann aber M/A enthalten
Perlit	Lamellar	P_L	Kooperatives Wachstum von Ferrit und Zementit	-	Keine Matrixphase in Multiphasenstählen
	Degeneriert	P_D			
	Kleine Kolonien	P_F			
Displazive Phasenumwandlung					
Bainitischer Ferrit	Widmanstätten	α_W	Große, gestreckte Platten	Keine Substruktur IQ hoch, KAM niedrig	Bildung an γ -Korngrenzen oder α_P Allotriomorphen
	Azikular	α_A	Feine, nadelförmige, in sich verflochten Struktur Bildung innerhalb γ -Korn	Mehrere Ferrit-Orientierungsvarianten	-
	Granular	$\alpha_{B(G)}$	Moderat erholt Keine Lattenstruktur γ -Korngrenzen werden erhalten	Hohe Versetzungsdichte IQ niedrig, KAM hoch	Verbunden mit granularen zweiten Phasen
	Lattenförmig	α_B	Lattenförmig, in Bündeln γ -Korngrenzen werden erhalten	Hohe Versetzungsdichte IQ niedrig, KAM hoch	-
Martensit	Latten	α'_L	Versetzungsreicher Lattenmartensit bei niedrigen bis mittleren C-Gehalten	IQ sehr niedrig	α'_L und α'_T nur im TEM unterscheidbar
	Platten	α'_T	Verzwilligter Plattenmartensit bei höheren C-Gehalten	IQ sehr niedrig	
Verformung					
	Deformierter Ferrit	α_D	Gestreckte Körner mit Scherbändern	Hohe Versetzungsdichte IQ niedrig, KAM hoch	-

Tabelle 10-15: morphologische und kristallographische Charakteristika der C-reichen Zweitphase [3] (Tabelle 2.3).

Zweitphase	Substruktur	Symbol	Morphologisch (LM, REM)	Kristallographisch (EBSD)	Bemerkungen
ϵ -Karbide	-	ϵ	Semi-kohärenter Partikel in der Ferritmatrix	-	Nur im TEM erkennbar
Zementit	-	Cem Fe ₃ C	Inkohärente Partikel	3 Orientierungsvarianten zum Ferrit	Kontrastierung durch Heiß-Ätzung mit Natrium-Pikrat möglich
Restaustenit	-	RA	C-reicher Restaustenit Überwiegend polygonal Glatt ohne innere Struktur	XRD: krz Gitterkonstante variiert mit C-Gehalt	Kann nach Nital-Ätzung oder Elektropolitur Spuren des mechanischen Polierens aufweisen
Martensit/ Austenit Bestandteil	-	M/A	Inseln aus Martensit und Austenit	Kristallographische Orientierungsbeziehung zwischen Austenit und Martensit	-
Produkte unvollständiger Umwandlung	-	Mix	Bruchstücke von Produkten unvollständiger Umwandlung	-	-
Bainit	Karbidfrei	B _{C-free}	M/A Inseln anstelle des Zementits	-	-
	Oberer	B _U	Zementit zwischen den Latten	-	Nicht-kooperatives Wachstum
	Unterer	B _L	Zementit innerhalb der Latten	-	Nicht-kooperatives Wachstum
Perlit	Lamellar	P _L	Produkt der eutektoiden Umwandlung	-	Kooperatives Wachstum
	Degeneriert	P _D	Produkt einer unvollständigen eutektoiden Umwandlung	-	Kooperatives Wachstum
Martensit	Strukturlos	M ₁	Nach der Ätzung: glatt, ohne innere Struktur (LM) bzw. leichte Struktur (REM)	IQ, CI sehr niedrig, KAM sehr hoch	Hoher C-Gehalt
	Strukturiert	M ₂	Nach der Ätzung: innere Struktur (LM)	IQ, CI sehr niedrig, KAM sehr hoch	Niedriger C-Gehalt
	(selbst-)angelassen	TM	Mit ϵ -Karbiden oder Zementit	IQ, CI niedrig, KAM hoch	Nur mit TEM von M _{1/2} unterscheidbar

Matrosov (2012)

Matrosov et al. [25] führen TEM-Untersuchungen an niedrig C-haltigen Linepipe Stählen durch. Orientiert am ISIJ-Schema schlagen sie folgende Klassifizierungssystem für die kohlenstoffarme Matrix-Phase () und die kohlenstoffreiche Zweitphase vor.

Tabelle 10-16: Klassifizierungsschema nach Matrosov et al. für die kohlenstoffarme Matrix-Phase, nach [25].

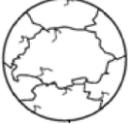
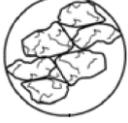
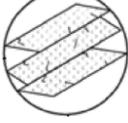
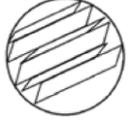
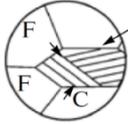
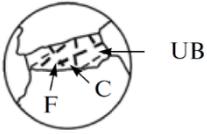
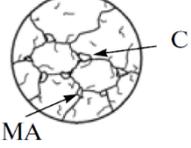
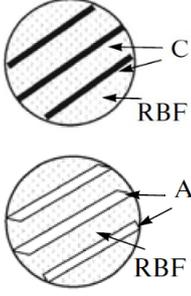
Gefüge	Schema	Beschreibung
Polygonaler Ferrit (PF)		Diffusionsgesteuerte Umwandlung bei hohen Temperaturen (> 650 °C) Gleichachsige Körner Geringe Versetzungsdichte, überwiegend Großwinkel-Korngrenzen
Quasi-polygonaler Ferrit (QPF)		Mischung aus diffusionsgesteuerter und displaziver Umwandlung, im Bereich 580-620 °C Kleinere Körner und höhere Versetzungsdichte als PF Korngrenzen leicht gekrümmt Leichte Substruktur
Granularer bainitischer Ferrit (GBF)		Überwiegend displazive Umwandlung, bei Temperaturen < 600 °C Relativ gleichachsige bis irreguläre Körner Versetzungsdichte deutlich höher als bei QBF
Plattenförmiger bainitischer Ferrit (rack bainitic ferrite, RBF)		Überwiegend displazive Umwandlung, bei Temperaturen < 600 °C Pakete aus Platten, getrennt durch Großwinkel-Korngrenzen Platten im Paket getrennt durch Kleinwinkel-Korngrenzen Versetzungsdichte deutlich höher als bei QBF
Niedrig-kohliger Platten-Martensit (M)		Martensitische Umwandlung Ähnliche Morphologie wie bei niedrigen Temperaturen gebildeter Bainit, jedoch höhere Versetzungsdichte und feinere Platten

Tabelle 10-17: Klassifizierungsschema nach Matrosov et al. für die kohlenstoffreiche Zweitphase, nach [25].

Gefüge	Schema	Beschreibung
Inselförmig		
Perlit (P)		Diffusionsgesteuerte Umwandlung Perlit-Kolonien aus Ferrit und dünnen Zementitplatten
Degenerierter Perlit (DP)		Ungenügende Zeit zur Diffusion, sodass die Ausbildung der Zementitplatten eingeschränkt ist Kleinere Kolonien als P Zementit rundlich in der Kolonie und gestreckt an den Koloniegrenzen

Fortsetzung von Tabelle 10-17

<p>Oberer Bainit (UB)</p>		<p>Niedrigere Bildungstemperatur als P, DP Mischung aus Ferrit und Zementitplatten Gleichachsige Bereiche bei hoher Bildungstemperatur, gestreckte bei niedriger Bildungstemperatur Ähnliches Erscheinungsbild wie P und DP</p>
<p>Unterer Bainit (LB)</p>	<p>-</p>	<p>Mischung aus Ferrit und Zementitplatten Im Gegensatz zu UB befinden sich die Zementitplatten innerhalb des Ferrits</p>
<p>Martensit/ Austenit Bestandteile</p>		<p>Mischung aus Zwillings-Martensit und Restaustenit Bildet sich aus in C und Legierungselementen angereichertem Austenit In der Regel kleine Bereiche (5-10 µm)</p>
<p>Zwillings-Martensit</p>		<p>-</p>
<p>Regulär</p>		
<p>Partikel (Zementit, M/A) in GBF</p>		<p>-</p>
<p>Filme (Zementit, M/A) in RBF</p>		<p>-</p>

Die Vielzahl an Klassifizierungsschemata erschwert das Finden eines gemeinsamen Konsenses zur Beschreibung und Beurteilung bainitischer Gefüge. Da so viele Bezeichnungen verfügbar sind, aus denen man die aussuchen kann, die am besten zu den vorliegenden Gefügen passen, können auch schnell viele weitere Klassifizierungssysteme entstehen.

10.2 Machine Learning Hyperparameter

Konventionelles ML: Hyperparameter am Beispiel einer SVM (MATLAB Classification Learner App [222])

- Kernel-Funktion: bestimmt, in welchen höherdimensionalen Raum ein lineares Problem transformiert wird.
- Kernel-scale: lediglich bei der Verwendung eines RBF-Kernels relevant.
- Multi-class Methode: bestimmt, ob eine Klasse jeweils nur von einer anderen Klasse („One-vs-One“), oder gleichzeitig von allen Klassen („One-vs-All“) unterschieden wird.
- Box Constraint Level: Maß für die „soft-margin“ Hyperebene, die den Grad der tolerierbaren Fehlklassifizierungen bestimmt.
- Standardize: bestimmt, ob die Daten vor dem Input in die SVM auf Werte zwischen 0 und 1 normalisiert werden.

Deep Learning: Hyperparameter am Beispiel eines CNN

Im Gegensatz zum konventionellen ML gibt es beim DL, hier bei CNNs zur Klassifizierung, eine größere Anzahl Hyperparameter. Dies beginnt schon bei der Netzwerkkonstruktion, z.B. Anzahl der Convolutional Layer, Pooling Layer, Fully connected Layer oder Art des Poolings und Art der Aktivierungsfunktion. Generell können die idealen Gewichte eines CNN nicht berechnet werden, da es zu viele unbekannte Parameter gibt. Stattdessen wird dies als ein Optimierungsproblem behandelt, und ein Algorithmus wird verwendet, um den Datenraum möglicher Gewichte zu durchsuchen und ein Optimum zu finden [244].

Im Folgenden werden einige relevante Hyperparameter kurz beschrieben, gemäß [107,244]:

- Optimizer: Optimizer sind Algorithmen, die verwendet werden, um Parameter des CNN wie Gewichte und Lernrate zu ändern, um den „Loss“ zu reduzieren, also die Loss Funktion zu minimieren.
- Loss Funktion: Die Loss Funktion wird genutzt, um den Loss des Modells abzuschätzen, damit die Gewichte des CNN aktualisiert werden können, um in der nächsten Iteration den Loss zu reduzieren. Vereinfacht gesagt schätzt die Loss Funktion ab, wie gut das aktuelle Modell den Datensatz abbildet.
- Learning rate: Die learning rate bestimmt, wie schnell das CNN seine Parameter aktualisiert. Eine niedrige learning rate hat einen langsamen Trainingsprozess zur Folge, konvergiert i.d.R. aber immer. Eine hohe learning rate beschleunigt das Training, eine zu hohe learning rate führt jedoch möglicherweise nicht zur Konvergenz.

- Batch size: Die Batch size legt die Anzahl der Stichproben fest, die durchlaufen wird, bevor die Modellparameter aktualisiert werden. Ein prinzipieller Vorteil einer großen Batch size ist, dass das Netzwerk mehr Stichproben pro Sekunde sieht. Allerdings ist die Batch size durch RAM- und GPU-Kapazität beschränkt. Außerdem kann eine große Batch size zu Instabilitäten während des Modelltrainings führen. Daher gibt es unterschiedliche Sichtweisen, ob eine kleine oder große Batch size zu bevorzugen ist.
- Anzahl der Trainings-Epochen: Die Anzahl der Epochen legt fest, wie oft der Lernalgorithmus den gesamten Trainingsdatensatz durcharbeitet. Wird ein CNN für zu viele Epochen trainiert, kommt es zur Überanpassung. Als Faustregel gilt, das CNN so lange zu trainieren, bis die Validierungsgenauigkeit wieder abnimmt, während die Trainingsgenauigkeit noch weiter zunimmt.

10.3 Gefügebildungen

Nachfolgende Abbildungen zeigen repräsentative LM-Aufnahmen der unterschiedlichen, verwendeten Zweiphasenstähle. Einzelne Zweitphase-Objekte werden als korrelative REM-Bilder dargestellt.

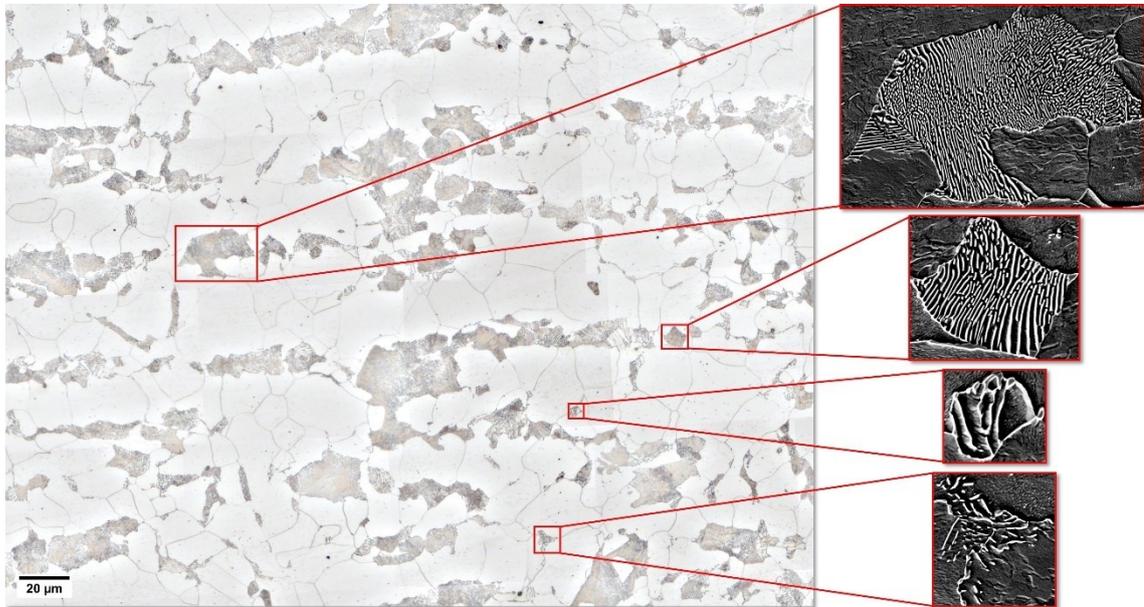


Abbildung 10-2: LM-Aufnahme eines ferrit-perlitischen Zweiphasenstahls mit vergrößerten REM-Aufnahmen einzelner Zweitphase-Objekte. Perlit liegt überwiegend regulär vor, vereinzelt auch degeneriert.

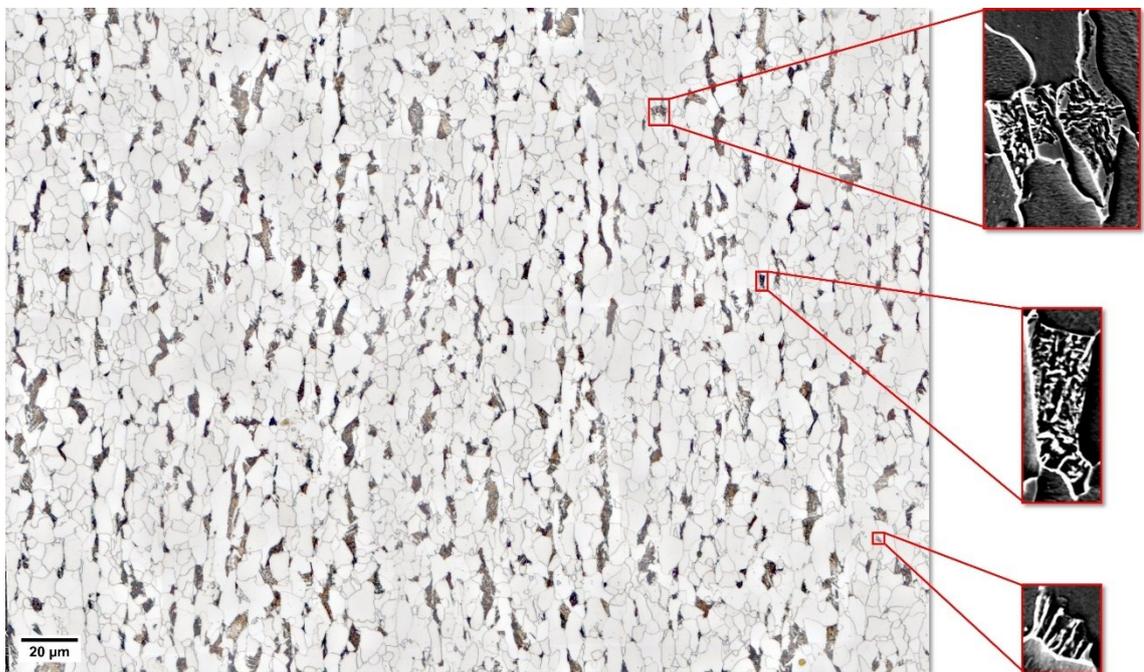


Abbildung 10-3: LM-Aufnahme eines ferrit-bainitischen Zweiphasenstahls mit vergrößerten REM-Aufnahmen einzelner Zweitphase-Objekte. Die bainitischen Bestandteile lassen sich den Arten Zementit-Bruchstücke, Produkte unvollständiger Umwandlung und degenerierter Perlit zuordnen.

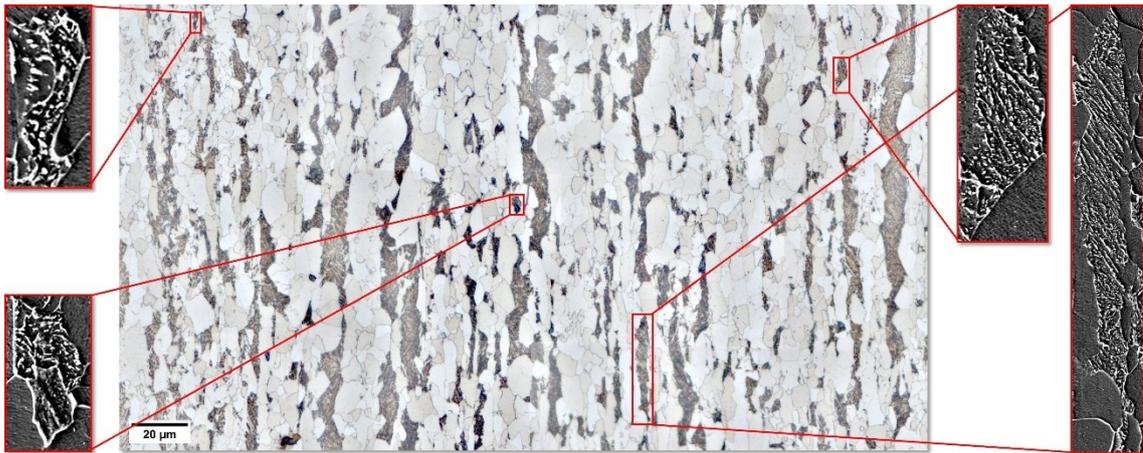


Abbildung 10-4: LM-Aufnahme eines ferrit-bainitischen Zweiphasenstahls mit vergrößerten REM-Aufnahmen einzelner Zweitphase-Objekte. Die bainitischen Bestandteile lassen sich den Arten oberer und unterer Bainit sowie Zementit-Bruchstücke und Produkte unvollständiger Umwandlung zuordnen.



Abbildung 10-5: LM-Aufnahme eines ferrit-bainitischen Zweiphasenstahls mit vergrößerten REM-Aufnahmen einzelner Zweitphase-Objekte.

10.4 Datenaufbereitung und Registrierung von EBSD-Daten und Mikroskopaufnahmen

Im Folgenden werden die Registrierung von tabellarischen EBSD-Daten und Mikroskopaufnahmen im Bildformat, die in 6.3 lediglich vereinfacht zusammengefasst wurde, sowie die dafür notwendige Datenaufbereitung detailliert erläutert.

- Zunächst müssen die EBSD-Daten zugänglich gemacht werden. Dies erfolgt in MATLAB (Version R2020a) über die Toolbox MTEX (Version 5.6.0).
- Die EBSD-Daten werden als .osc Datei in MTEX eingelesen. Zu Beginn werden in MTEX dieselben Cleanups wie in TSL OIM Analysis angewendet (4.6). Anschließend werden die gewünschten EBSD-Parameter berechnet. Diese liegen in MTEX anschließend in Form einer tabellarischen Liste vor.
- Folgende EBSD-Parameter werden als Liste ausgegeben: IQ, CI, KAM 1. Ordnung, KAM 3. Ordnung, GAM, GOS, Euler Winkel und x, y Koordinaten (Abbildung 10-6).
- Die EBSD-Parameter müssen jetzt in dasselbe Format wie die Bilder gebracht werden, d.h. in eine 2-dim. Matrix. Dies erfolgt über die x- und y-Koordinaten der Messpunkte mit MATLAB Funktionen oder integrierten MTEX-Funktionen.
- Wird bei der EBSD-Messung ein hexagonales Grid verwendet, stehen an manchen x- und y-Positionen der Matrix keine Messwerte. Diese fehlenden Werte werden durch MATLAB Funktionen interpoliert. Dafür könnte auch die integrierte MTEX-Funktion „gridify“ zum Umwandeln hexagonaler in reguläre Grids verwendet werden. Bei einer EBSD-Messung mit regulärem Grid entfällt dieser Schritt.
- Diese Matrixdarstellung der EBSD-Daten wird für alle gewünschten EBSD-Parameter erzeugt, die nachfolgend als multidimensionales Array kombiniert werden (Abbildung 10-6).
- Die LM- und REM-Aufnahme werden nun auf dieses Datenarray registriert, da dies einfacher umzusetzen ist als das Datenarray auf Mikroskop-Aufnahmen zu registrieren. D.h. das EBSD-Datenarray ist jetzt die Referenz/ das Target, auf die registriert wird.
- Wichtig zu bedenken ist nun, dass die „Auflösung“ des Datenarrays, bestimmt durch die Schrittweite der EBSD-Messung, i.d.R. geringer ist als die Auflösung der REM-Aufnahme und ggfs. auch geringer als die der LM-Aufnahme. Bei einer Registrierung der hochaufgelösten REM-Aufnahme auf das EBSD-Datenarray würde folgerichtig Auflösung und damit die wertvollen Informationen über die Substruktur der Gefüge verloren gehen.
- Dies kann über zwei Varianten vermieden werden. Zum einen kann das EBSD-Datenarray durch Skalieren und Interpolieren (z.B. über die MTEX-Funktion „interp“) auf die Auflösung der REM-Aufnahme gebracht werden („Variante 1“). Je nach Schrittweite der EBSD-Messung

kann dies aber ein signifikantes Maß an Interpolation erfordern. Zum anderen, falls kein zu großes Maß an Interpolation erwünscht ist, können zwei unterschiedlich skalierte Masken für die spätere objektweise Quantifizierung (6.3) generiert werden (normalaufgelöst für LM und EBSD Datenmatrix, hochaufgelöst für REM). Dieser Ansatz wird in Kürze erläutert („Variante 2“).

- Für die Registrierung wird nun ein geeigneter EBSD-Parameter des Datenarrays (wiederum die IQ, wie in 6.2) als Grauwertbild exportiert (Abbildung 10-6). Dadurch können erneut die etablierten Abläufe der Bild-Registrierung mittels SIFT und bUnwarpJ angewendet werden.

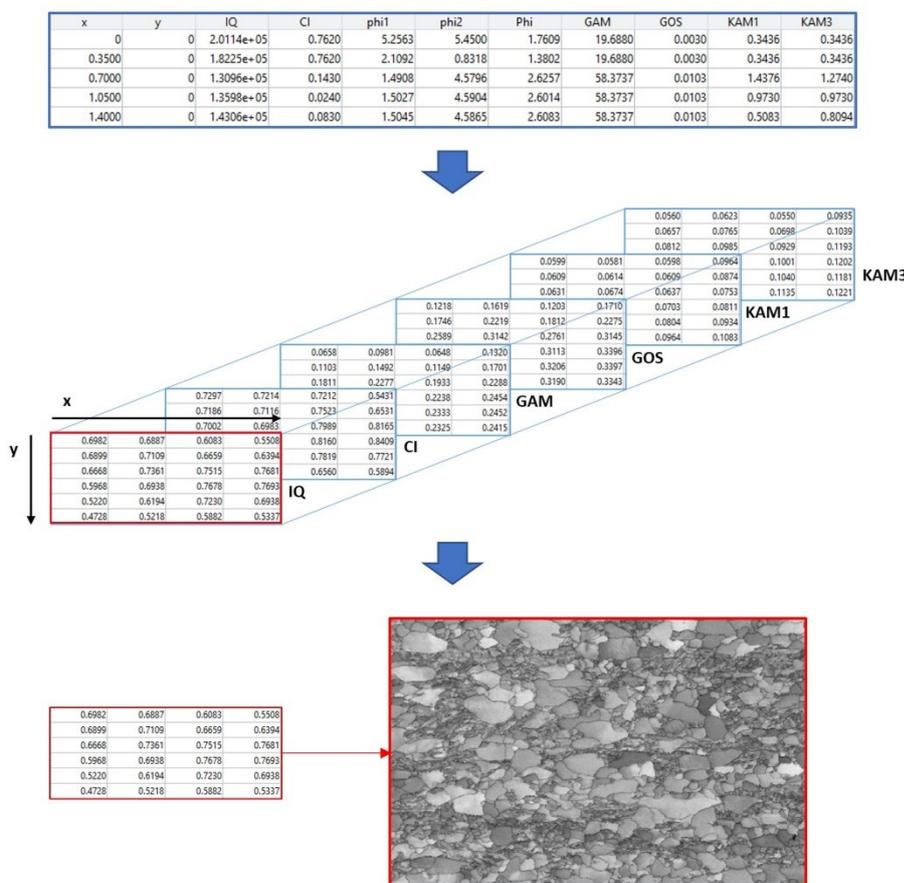


Abbildung 10-6: Datenaufbereitung für Registrierung: Listendarstellung der EBSD-Parameter wird in eine Matrixdarstellung überführt und alle Parameter in einem multidimensionalen Array gespeichert. Aus diesem Array werden die IQ-Werte als Grauwertbild exportiert.

- Die LM-Aufnahme wird jetzt auf diese exportierte IQ-Aufnahme registriert. Erneut wird die Transformationsmatrix abgespeichert, um eine segmentierte LM-Aufnahme ebenfalls registrieren zu können.
- Im Fall der Variante 1 (hochskaliertes und interpoliertes EBSD-Datenarray) kann nun die REM-Aufnahme ohne Auflösungsverlust auf die registrierte LM-Aufnahme registriert

werden. Bei Variante 2 würde durch die Registrierung der REM- auf die registrierte LM-Aufnahme allerdings viel Auflösung verloren gehen. Dies kann durch einen Umweg über ein Umskalieren verhindert werden. Die registrierten LM-Aufnahmen (original und segmentiert) werden hochskaliert auf die Auflösung der REM-Aufnahme. Anschließend wird die REM-Aufnahme auf diese hochskalierte, auf die IQ registrierte LM-Aufnahme registriert. Dabei geht keine Auflösung der REM-Aufnahme verloren.

- Dadurch sind letztlich alle Aufnahmen (als Bild exportiere IQ sowie das zugehörige multidimensionale EBSD-Datenarray, LM, LM segmentiert und REM) aufeinander registriert. Lediglich haben, bei Variante 2, die REM-Aufnahme und die korrespondierende Maske zur objektweisen Auswertung eine höhere Auflösung.

Der gesamte Auswerte-Workflow von Datenaufbereitung bis zur Registrierung und Auswertung ist im folgenden Flowchart visualisiert:



Abbildung 10-7: Auswerte-Workflow der EBSD-Quantifizierung („Variante 2“).

Bei der Aufbereitung der EBSD-Daten kann bei der Umwandlung des hexagonalen Grids in eine reguläre Matrix oder durch ein Hochskalieren des EBSD-Datenarrays eine nicht unerhebliche Menge an Interpolation erfolgen. Durch diese Interpolation entstehen auch leichte Unterschiede in GOS und GAM Werten innerhalb eines Kornes, obwohl es sich dabei um kornbasierte Werte handelt, die aus allen Messwerten innerhalb des Kornes berechnet wurden und für das gesamte Korn denselben Wert haben sollten. Für zukünftige Auswertungen könnte bei der Datenaufbereitung eine Bedingung implementiert werden, dass nach der Interpolation bei den kornbasierten EBSD-Parametern zu keinen Unterschieden innerhalb des Kornes kommen darf. In der aktuellen Version der Auswerteskripte ist dies noch nicht ergänzt. Da die Unterschiede jedoch gering sind, wird dieser Einfluss der Interpolation zunächst hingenommen.

10.5 Datensatz des vorherigen Promotionsprojekt

Ausgangspunkt ist der in der Vorarbeit [205] generierte Datensatz. Die Entstehung des Datensatzes sowie in dieser Arbeit ergänzte Parameter werden im Folgenden erläutert. Die Proben wurden wie in 4.4 beschrieben präpariert. Zusätzlich wurde ein finaler Politurschritt mit einer kolloidalen Si-Suspension von $0,04\ \mu\text{m}$ (OPS) durchgeführt. Die Kontrastierung der Proben erfolgte mittels modifizierter Beraha Ätzung (4.5). Diese Ätzung wurde gewählt, da die Substruktur der zweiten Phase im REM sehr gut aufgelöst wird, und gleichzeitig die Ferrit-Korngrenzen nur schwach kontrastiert werden, sodass die zweite Phase in der LM-Aufnahme über simples Schwellwertsetzen segmentiert werden kann.

Zur Charakterisierung kam ein korrelativer Ansatz aus LM und REM zum Einsatz. Die REM-Aufnahmen werden zur Auswertung der Substruktur der zweite Phase Objekte benötigt, die LM-Aufnahme zur einfachen Segmentierung der zweite Phase Objekte. Zunächst wurde eine ROI mittels Härteeindrücken markiert. LM-Aufnahmen wurden in einem LEICA DM6000M bei 1000-facher Vergrößerung angefertigt. Die REM-Aufnahmen stammen aus einem Zeiss Merlin FEG-REM mit einer Beschleunigungsspannung von 5 kV, 10000 pA, Strahlstrom, bei 5 mm Arbeitsabstand. Es wurde ein Everhart-Thornley Sekundärelektronendetektor verwendet, die Vergrößerung war 1000-fach mit einer Bildgröße von 4096×3072 px (Pixelgröße = 27.91 nm). Zur Abbildung der gesamten ROI wurden sowohl in LM als auch REM mehrere Einzelaufnahmen gemacht und anschließend zu einer großen Aufnahme zusammengesetzt. Die Registrierung von LM und REM erfolgte in ImageJ über die Plugins SIFT Feature Extraction und bUnwarpJ (2.2.2). Über Schwellwertsetzen wurde in den LM-Aufnahmen die zweite Phase segmentiert. Die segmentierte LM-Aufnahme stellt eine binäre Maske dar, in der zweite Phase Objekte definiert werden können. Mit dieser binären Maske wird die REM-Aufnahme maskiert. Dadurch wird die Ferritmatrix, die für die Auswertung nicht von Interesse ist, entfernt und es verbleiben lediglich die zweite Phase Objekte in der Aufnahme, die anschließend separat extrahiert und ausgewertet werden.

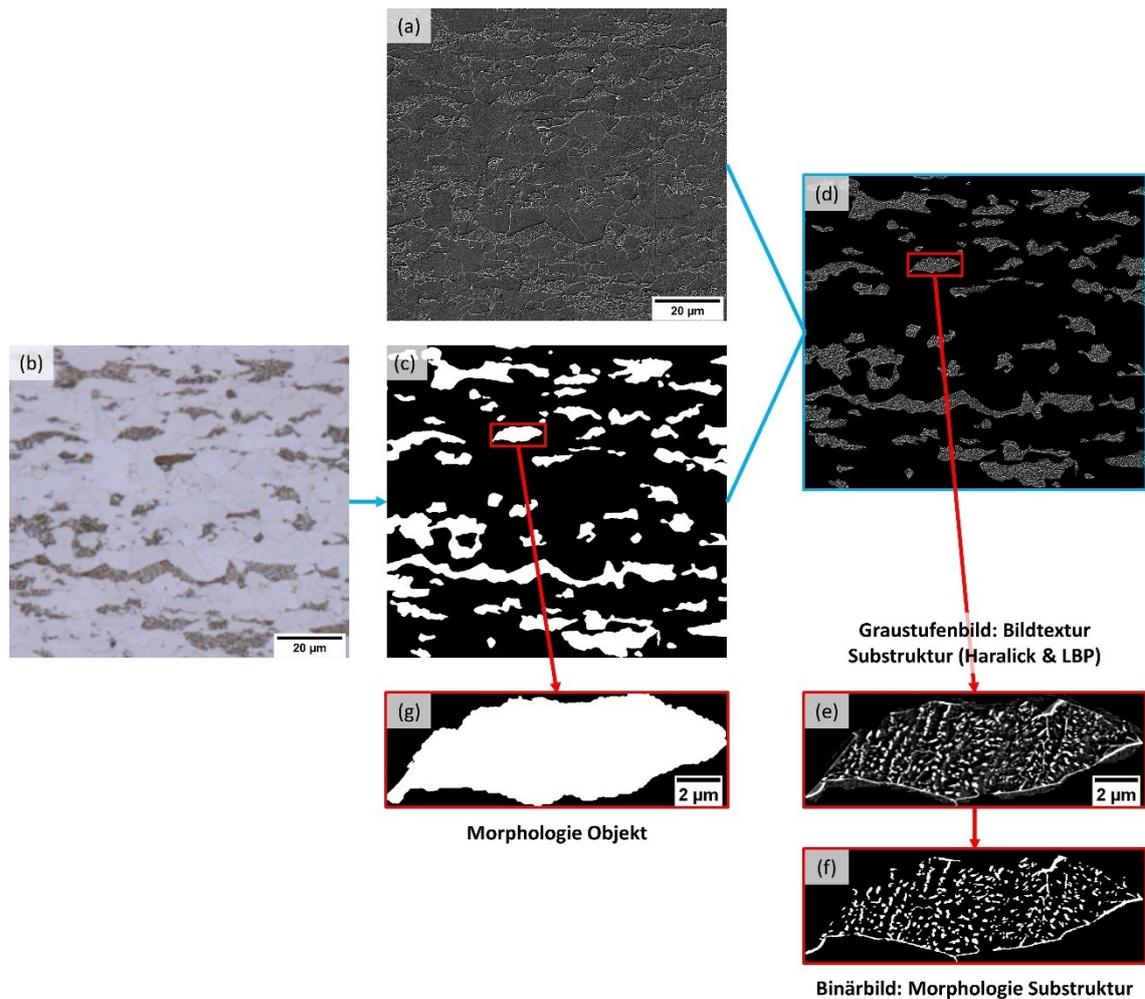


Abbildung 10-8: (a) REM-Aufnahme. (b) Korrelative LM-Aufnahme. (c) Segmentierte LM-Aufnahme: dient der Definition und separaten Extraktion der Zweitphase Objekte (d) Maskierte REM-Aufnahme: lediglich die Zweitphase Objekte verbleiben im Bild. (e) Graustufenbild des Objektes in der REM-Aufnahme: dient der Auswertung der Bildtextur der Substruktur. (f) binarisiertes Bild aus (e): dient der Auswertung der Morphologie der Substruktur. (g) Objekt in der LM-Aufnahme: dient der Auswertung der Objekt-Morphologie.

10.6 Extrahierte Merkmale für die Klassifizierung der Zweiphasenstähle

Folgende Merkmale der Zweitphase Objekte wurden für die ML-Klassifizierung der Zweiphasenstähle (7.2.1) aus den Gefügeaufnahmen erhoben: (1) die Morphologie der Substruktur (46 Merkmale), (2) die Bildtextur der Substruktur in Form von Haralick Parametern (38 Merkmale) und LBP (56 Merkmale). Tabelle 10-18 auf den folgenden Seiten zeigt alle 140 extrahierten Gefügemerkmale, unterteilt in die drei Parametergruppen. In blauer Schrift sind die 72 nach dem Entfernen korrelierender Parameter verbliebenden Merkmale gekennzeichnet (7.3.1). Zusätzlich in fetter Schrift sind die 40 Merkmale des finalen Modells nach der Merkmalsauswahl hervorgehoben.

Anhang 10.6, Extrahierte Merkmale für die Klassifizierung der Zweiphasenstähle

Tabelle 10-18: Aus den Gefügeaufnahmen extrahierte Merkmale der Zweitphase-Objekte für die ML-Klassifizierung. Blau = die 72 nach dem Entfernen korrelierender Parameter verbleibenden Merkmale. Blaue, fette Schrift = die 40 Merkmale des finalen Modells nach der Merkmalsauswahl.

Nr.	Haralick Texturparameter	Typ	Nr.	Morphologie der Substruktur	Typ	Nr.	LBP-Texturparameter	Histogramm Bin
1	Autocorrelation	Mittelwert	39	Total_subarea	-	85	LBP 1-8	bin_01
2	Autocorrelation	Amplitude	40	Subarea_Grain_area	-	86	LBP 1-8	bin_02
3	Contrast	Mittelwert	41	Equiv_Diameter	Mittelwert	87	LBP 1-8	bin_03
4	Contrast	Amplitude	42	Equiv_Diameter	Standardabweichung	88	LBP 1-8	bin_04
5	Correlation	Mittelwert	43	Major_axis_length	Mittelwert	89	LBP 1-8	bin_05
6	Correlation	Amplitude	44	Major_axis_length	Standardabweichung	90	LBP 1-8	bin_06
7	Cluster_Prominence	Mittelwert	45	Minor_axis_length	Mittelwert	91	LBP 1-8	bin_07
8	Cluster_Prominence	Amplitude	46	Minor_axis_length	Standardabweichung	92	LBP 1-8	bin_08
9	Cluster_Shade	Mittelwert	47	Perimeter	Mittelwert	93	LBP 1-8	bin_09
10	Cluster_Shade	Amplitude	48	Perimeter	Standardabweichung	94	LBP 1-8	bin_10
11	Dissimilarity	Mittelwert	49	Equiv_radius	Mittelwert	95	LBP 2.4-8	bin_01
12	Dissimilarity	Amplitude	50	Equiv_radius	Standardabweichung	96	LBP 2.4-8	bin_02
13	Energy	Mittelwert	51	Max_Feret_diameter	Mittelwert	97	LBP 2.4-8	bin_03
14	Energy	Amplitude	52	Max_Feret_diameter	Standardabweichung	98	LBP 2.4-8	bin_04
15	Entropy	Mittelwert	53	Min_Feret_diameter	Mittelwert	99	LBP 2.4-8	bin_05
16	Entropy	Amplitude	54	Min_Feret_diameter	Standardabweichung	100	LBP 2.4-8	bin_06
17	Homogeneity	Mittelwert	55	Mittelwert_Feret_diameter	Mittelwert	101	LBP 2.4-8	bin_07
18	Homogeneity	Amplitude	56	Mittelwert_Feret_diameter	Standardabweichung	102	LBP 2.4-8	bin_08
19	Max_probability	Mittelwert	57	Convex_perimeter	Mittelwert	103	LBP 2.4-8	bin_09
20	Max_probability	Amplitude	58	Convex_perimeter	Standardabweichung	104	LBP 2.4-8	bin_10
21	Variance	Mittelwert	59	Area	Mittelwert	105	LBP 4.2-16	bin_01
22	Variance	Amplitude	60	Area	Standardabweichung	106	LBP 4.2-16	bin_02
23	Sum_average	Mittelwert	61	Convex_area	Mittelwert	107	LBP 4.2-16	bin_03
24	Sum_average	Amplitude	62	Convex_area	Standardabweichung	108	LBP 4.2-16	bin_04
25	Sum_variance	Mittelwert	63	Filled_area	Mittelwert	109	LBP 4.2-16	bin_05
26	Sum_variance	Amplitude	64	Filled_area	Standardabweichung	110	LBP 4.2-16	bin_06
27	Sum_entropy	Mittelwert	65	Relativ_area	Mittelwert	111	LBP 4.2-16	bin_07

Anhang 10.6, Extrahierte Merkmale für die Klassifizierung der Zweiphasenstähle

Nr.	Haralick Texturparameter	Typ	Nr.	Morphologie der Substruktur	Typ	Nr.	LBP-Texturparameter	Histogramm Bin
28	Sum_entropy	Amplitude	66	Relativ_area	Standardabweichung	112	LBP 4.2-16	bin_08
29	Difference_variance	Mittelwert	67	Convex_area_Filled_area	Mittelwert	113	LBP 4.2-16	bin_09
30	Difference_variance	Amplitude	68	Convex_area_Filled_area	Standardabweichung	114	LBP 4.2-16	bin_10
31	Difference_entropy	Mittelwert	69	Axial_ratio	Mittelwert	115	LBP 4.2-16	bin_11
32	Difference_entropy	Amplitude	70	Axial_ratio	Standardabweichung	116	LBP 4.2-16	bin_12
33	Info_measure_of_correlation1	Mittelwert	71	Aspect_ratio	Mittelwert	117	LBP 4.2-16	bin_13
34	Info_measure_of_correlation1	Amplitude	72	Aspect_ratio	Standardabweichung	118	LBP 4.2-16	bin_14
35	Info_measure_of_correlation2	Mittelwert	73	Roundness	Mittelwert	119	LBP 4.2-16	bin_15
36	Info_measure_of_correlation2	Amplitude	74	Roundness	Standardabweichung	120	LBP 4.2-16	bin_16
37	Inverse_difference	Mittelwert	75	Circularity	Mittelwert	121	LBP 4.2-16	bin_17
38	Inverse_difference	Amplitude	76	Circularity	Standardabweichung	122	LBP 4.2-16	bin_18
			77	Sphericity	Mittelwert	123	LBP 6.2-16	bin_01
			78	Sphericity	Standardabweichung	124	LBP 6.2-16	bin_02
			79	Convex_perimeter_Filled_perimeter	Mittelwert	125	LBP 6.2-16	bin_03
			80	Convex_perimeter_Filled_perimeter	Standardabweichung	126	LBP 6.2-16	bin_04
			81	Form_factor	Mittelwert	127	LBP 6.2-16	bin_05
			82	Form_factor	Standardabweichung	128	LBP 6.2-16	bin_06
			83	Convexity	Mittelwert	129	LBP 6.2-16	bin_07
			84	Convexity	Standardabweichung	130	LBP 6.2-16	bin_08
						131	LBP 6.2-16	bin_09
						132	LBP 6.2-16	bin_10
						133	LBP 6.2-16	bin_11
						134	LBP 6.2-16	bin_12
						135	LBP 6.2-16	bin_13
						136	LBP 6.2-16	bin_14
						137	LBP 6.2-16	bin_15
						138	LBP 6.2-16	bin_16
						139	LBP 6.2-16	bin_17
						140	LBP 6.2-16	bin_18

10.7 Vergleich der Sampling-Strategien der ML-Klassifizierung der C-reichen Zweitphase in Zweiphasenstählen

Hier werden unterschiedliche Sampling-Strategien in Bezug auf den unausgewogenen Datensatz untersucht. Referenz ist das Modell, das mit dem originalen unausgewogenen Datensatz trainiert wurde. Die damit erzielten Klassifizierungsergebnisse werden denen nach under-sampling, over-sampling und SMOTE gegenübergestellt. Alle Modelle wurden mit allen 72 Merkmalen trainiert und es fand keine Hyperparameter-Optimierung statt. Die Modelle wurden am selben Testsatz evaluiert.

Tabelle 10-19: Konfusionsmatrix der Referenz: der gesamte unausgewogene Datensatz wurde verwendet.

		Accuracy 81.2%		F1 Score 81.0%							
				pred.	pred.	pred.	pred.	pred.	pred.	pred.	class
		DC	DP	ITP	M	OB	P	UB		precision	
true	DC	151	12	20	3	3	0	3		78.6%	
true	DP	21	32	6	0	0	6	0		49.2%	
true	ITP	31	3	125	11	0	0	1		73.1%	
true	M	1	3	5	101	0	0	0		91.8%	
true	OB	2	0	0	0	40	0	1		93.0%	
true	P	1	4	2	1	1	145	0		94.2%	
true	UB	3	0	1	0	2	0	39		86.7%	
class recall		71.9%	59.3%	78.6%	87.1%	87.0%	96.0%	88.6%			
F1 score		75.1%	53.8%	75.8%	89.4%	89.9%	95.1%	87.6%			

Under-sampling und over-sampling erreichen deutlich geringere Genauigkeiten als die unausgewogenen Daten, insbesondere bei den Klassen Zementit-Bruchstücke, oberer und unterer Bainit. Das bedeutet in diesem Fall, dass, ausgehend vom under-sampling und verglichen mit den unausgewogenen Daten, die Vorhersage aller Klassen verbessert wird, auch wenn nur neue Daten mancher Klassen hinzugefügt werden. SMOTE erreicht einen um etwa 1 % besseres F1 Score als die unausgewogenen Daten. Die Verbesserungen betreffen in erster Linie die Klassen degenerierter Perlit und unterer Bainit. Andere Klassen sind vergleichbar. Eine detailliertere Gegenüberstellung des F1 Scores für jede Klasse zeigt Abbildung 10-9.

Tabelle 10-20: Konfusionsmatrix des under-sampling: nur die Anzahl der Objekte der kleinsten Klasse berücksichtigt (jeweils 212 Objekte pro Klasse).

		Accuracy 75.3%		F1 Score 75.2%						
		pred.	pred.	pred.	pred.	pred.	pred.	pred.	class	
		DC	DP	ITP	M	OB	P	UB	precision	
true	DC	115	26	30	2	10	0	9	59.9%	
true	DP	9	43	6	0	3	4	0	66.2%	
true	ITP	25	10	112	15	5	0	4	65.5%	
true	M	0	7	6	97	0	0	0	88.2%	
true	OB	2	0	0	0	40	0	1	93.0%	
true	P	1	10	0	1	4	138	0	89.6%	
true	UB	1	0	0	0	2	0	42	93.3%	
class recall		75.2%	44.8%	72.7%	84.3%	62.5%	97.2%	75.0%		
F1 score		66.7%	53.4%	68.9%	86.2%	74.8%	93.2%	83.2%		

Anhang 10.7, Vergleich der Sampling-Strategien der ML-Klassifizierung der C-reichen Zweitphase in Zweiphasenstählen

Tabelle 10-21: Konfusionsmatrix des over-sampling: Datenpunkte unterrepräsentierter Klassen werden doppelt verwendet, kombiniert mit einem under-sampling der weiterhin überrepräsentierten Klassen (jeweils 424 Objekte pro Klasse).

		Accuracy 77.3%							F1 Score 78.4%
		pred.	pred.	pred.	pred.	pred.	pred.	pred.	class
		DC	DP	ITP	M	OB	P	UB	precision
true	DC	118	29	32	3	6	0	4	61.5%
true	DP	10	45	4	0	1	5	0	69.2%
true	ITP	29	7	114	17	0	0	4	66.7%
true	M	4	4	1	101	0	0	0	91.8%
true	OB	0	0	0	0	41	0	2	95.3%
true	P	2	6	0	1	1	144	0	93.5%
true	UB	4	0	0	0	1	0	40	88.9%
class recall		70.7%	49.5%	75.5%	82.8%	82.0%	96.6%	80.0%	
F1 score		65.7%	57.7%	70.8%	87.1%	88.2%	95.0%	84.2%	

Nach Merkmals-Auswahl und Hyperparameter-Optimierung kann allerdings kein signifikanter Unterschied mehr zwischen SMOTE und unausgewogenen Daten festgestellt werden. Ob das Verwenden von SMOTE langfristig gesehen eine bessere Klassifizierung ermöglicht, kann lediglich bei einer Serienanwendung dieser ML-Klassifizierung beurteilt werden.

Tabelle 10-22: Konfusionsmatrix nach SMOTE: Anzahl der Objekte für jede Klasse wird auf die Anzahl der größten Klasse erhöht (jeweils 964 Objekte pro Klasse), Verwendung der Standardparameter (k=5).

		Accuracy 81.7%							F1 Score 82.1%
		pred.	pred.	pred.	pred.	pred.	pred.	pred.	class
		DC	DP	ITP	M	OB	P	UB	precision
true	DC	146	18	21	1	3	0	3	76.0%
true	DP	14	40	5	0	1	6	0	60.6%
true	ITP	25	7	127	11	0	0	1	74.3%
true	M	3	2	5	100	0	0	0	90.9%
true	OB	1	0	0	0	40	0	2	93.0%
true	P	3	5	2	0	1	143	0	92.9%
true	UB	2	0	0	0	1	0	42	93.3%
class recall		75.3%	55.6%	79.4%	89.3%	87.0%	96.0%	87.5%	
F1 score		75.6%	58.0%	76.7%	90.1%	89.9%	94.4%	90.3%	

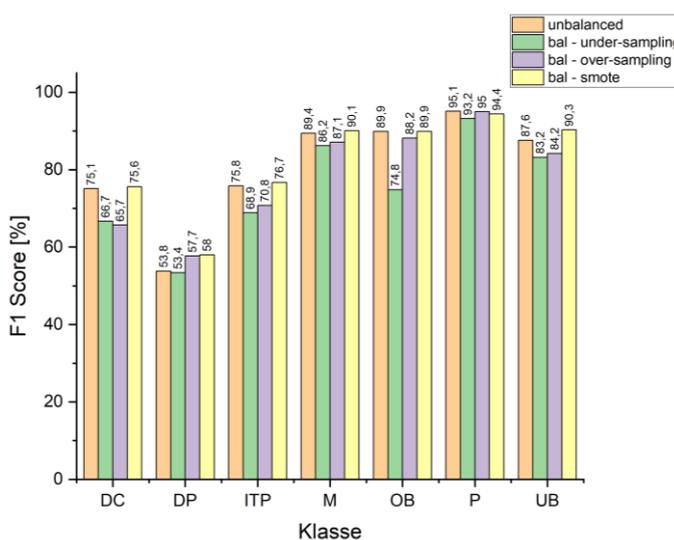


Abbildung 10-9: Gegenüberstellung des F1 Scores jeder Klasse für die vier verschiedenen Sampling-Strategien.

10.8 Vergleich der Klassifizierungsstrategien der ML-Klassifizierung der C-reichen Zweitphase in Zweiphasenstählen

In diesem Abschnitt werden die Ergebnisse der verschiedenen Klassifizierungsstrategien, also des gleichzeitigen Klassifizierens aller sieben Klassen mit hierarchischen Klassifizierungen verglichen. Alle Modelle wurden mit allen 72 Merkmalen trainiert und es fand keine Hyperparameter Optimierung statt. Dabei werden die hierarchischen Modelle nicht individuell evaluiert, sondern bezogen auf die finale Einteilung in die sieben Klassen. Folgende Klassifizierungsstrategien werden getestet und am selben Testsatz miteinander verglichen.

1. Alle sieben Klassen werden auf einmal unterschieden:

Tabelle 10-23: Klassifizierungsstrategie 1: alle sieben Klassen werden auf einmal klassifiziert.

Schritt 1	P	DP	DC	ITP	OB	UB	M
-----------	---	----	----	-----	----	----	---

2. Eine hierarchische Klassifizierung, bei der zuerst Perlit, Bainit und Martensit unterschieden werden, wobei degenerierter Perlit der Hauptklasse Perlit angehört. Anschließend erfolgt die Unterscheidung von regulärem und degeneriertem Perlit sowie der Bainit-Unterklassen.

Tabelle 10-24: Klassifizierungsstrategie 2: hierarchische Klassifizierung.

Schritt 1	P		B				M
Schritt 2	P	DP	DC	ITP	OB	UB	-

3. Eine hierarchische Klassifizierung, bei der zuerst Perlit, Bainit und Martensit unterschieden werden, wobei degenerierter Perlit der Hauptklasse Bainit angehört. Anschließend erfolgt die Unterscheidung der Bainit-Unterklassen.

Tabelle 10-25: Klassifizierungsstrategie 3: hierarchische Klassifizierung.

Schritt 1	P	B					M
Schritt 2	-	DP	DC	ITP	OB	UB	-

4. Eine hierarchische Klassifizierung, bei der zuerst Perlit, granularer und lattenförmiger Bainit sowie Martensit unterschieden werden, wobei degenerierter Perlit der Hauptklasse granularer Bainit angehört. Anschließend erfolgt die Unterteilung der Unterklassen des granularen und lattenförmigen Bainits.

Tabelle 10-26: Klassifizierungsstrategie 4: hierarchische Klassifizierung.

Schritt 1	P	Granularer B			Lattenförmiger B		M
Schritt 2	-	DP	DC	ITP	OB	UB	-

Die Klassifizierungsstrategien 1-3 zeigen beinahe identische Ergebnisse (F1 Scores von 81,0%, 81,3 % and 81,0%). Die minimal bessere F1 Score von Strategie 2 wird dabei als nicht signifikant beurteilt. Lediglich Strategie 4 zeigt niedrigere Werte (F1 Score von 79,6%). Diese Ergebnisse legen nahe, dass trotz der Komplexität der untersuchten Klassen die Unterscheidung aller sieben Klassen auf einmal die Klassifizierungsgenauigkeit nicht beeinträchtigt.

Tabelle 10-27: Konfusionsmatrix der Klassifizierungsstrategie 1.

Accuracy 81.2%		F1 Score 81.0%							
		pred. DC	pred. DP	pred. ITP	pred. M	pred. OB	pred. P	pred. UB	class precision
true	DC	151	12	20	3	3	0	3	78.6%
true	DP	21	32	6	0	0	6	0	49.2%
true	ITP	31	3	125	11	0	0	1	73.1%
true	M	1	3	5	101	0	0	0	91.8%
true	OB	2	0	0	0	40	0	1	93.0%
true	P	1	4	2	1	1	145	0	94.2%
true	UB	3	0	1	0	2	0	39	86.7%
class recall		71.9%	59.3%	78.6%	87.1%	87.0%	96.0%	88.6%	
F1 score		75.1%	53.8%	75.8%	89.4%	89.9%	95.1%	87.6%	

Tabelle 10-28: Konfusionsmatrix der Klassifizierungsstrategie 2.

Accuracy 81.8%		F1 Score 81.3%							
		pred. DC	pred. DP	pred. ITP	pred. M	pred. OB	pred. P	pred. UB	class precision
true	DC	157	6	19	4	3	0	3	81.8%
true	DP	23	30	3	0	1	8	0	46.2%
true	ITP	32	4	124	10	0	0	1	72.5%
true	M	3	3	4	100	0	0	0	90.9%
true	OB	2	0	0	0	40	0	1	93.0%
true	P	1	5	1	0	0	147	0	95.5%
true	UB	2	0	1	0	2	0	40	88.9%
class recall		71.4%	62.5%	81.6%	87.7%	87.0%	94.8%	88.9%	
F1 score		76.2%	53.1%	76.8%	89.3%	89.9%	95.1%	88.9%	

Tabelle 10-29: Konfusionsmatrix der Klassifizierungsstrategie 3.

Accuracy 81.4%		F1 Score 81.0%							
		pred. DC	pred. DP	pred. ITP	pred. M	pred. OB	pred. P	pred. UB	class precision
true	DC	153	11	18	4	3	0	3	79.7%
true	DP	22	31	5	0	1	6	0	47.7%
true	ITP	32	3	124	11	0	0	1	72.5%
true	M	1	2	6	101	0	0	0	91.8%
true	OB	2	0	0	0	40	0	1	93.0%
true	P	1	5	1	0	1	146	0	94.8%
true	UB	2	0	1	0	2	0	40	88.9%
class recall		71.8%	59.6%	80.0%	87.1%	85.1%	96.1%	88.9%	
F1 score		75.6%	53.0%	76.1%	89.4%	88.9%	95.4%	88.9%	

Tabelle 10-30: Konfusionsmatrix der Klassifizierungsstrategie 4.

Accuracy 80.4%		F1 Score 79.6%							
		pred. DC	pred. DP	pred. ITP	pred. M	pred. OB	pred. P	pred. UB	class precision
true	DC	150	12	18	3	4	0	5	78.1%
true	DP	21	30	8	0	0	6	0	46.2%
true	ITP	32	3	124	10	0	1	1	72.5%
true	M	2	2	6	100	0	0	0	90.9%
true	OB	4	0	0	0	37	0	2	86.0%
true	P	1	4	2	0	1	146	0	94.8%
true	UB	2	0	1	0	2	0	40	88.9%
class recall		70.8%	58.8%	78.0%	88.5%	84.1%	95.4%	83.3%	
F1 score		74.3%	51.7%	75.2%	89.7%	85.1%	95.1%	86.0%	

10.9 Konfusionsmatrizen der ML-Klassifizierung der C-reichen Zweitphase in Zweiphasenstählen

Dieser Abschnitt zeigt die Konfusionsmatrizen alle trainierten Modelle (unausgewogene Daten, alle sieben Klassen werden auf einmal klassifiziert), von der Verwendung aller Parameter, über die Merkmalsauswahl bis zur Hyperparameter-Optimierung.

Tabelle 10-31: Konfusionsmatrix: alle Merkmale, keine Hyperparameter Optimierung.

		Accuracy 81.2%		F1 Score 81.0%					
		pred.	pred.	pred.	pred.	pred.	pred.	pred.	class
		DC	DP	ITP	M	OB	P	UB	precision
true	DC	151	12	20	3	3	0	3	78.6%
true	DP	21	32	6	0	0	6	0	49.2%
true	ITP	31	3	125	11	0	0	1	73.1%
true	M	1	3	5	101	0	0	0	91.8%
true	OB	2	0	0	0	40	0	1	93.0%
true	P	1	4	2	1	1	145	0	94.2%
true	UB	3	0	1	0	2	0	39	86.7%
class recall		71.9%	59.3%	78.6%	87.1%	87.0%	96.0%	88.6%	
F1 score		75.1%	53.8%	75.8%	89.4%	89.9%	95.1%	87.6%	

Tabelle 10-32: Konfusionsmatrix: nach Merkmals-Auswahl (40 Merkmale gemäß MRMR-Algorithmus), keine Hyperparameter Optimierung.

		Accuracy 82.2%		F1 Score 81.7%					
		pred.	pred.	pred.	pred.	pred.	pred.	pred.	class
		DC	DP	ITP	M	OB	P	UB	precision
true	DC	154	10	18	4	3	0	3	80.2%
true	DP	16	34	5	1	1	8	0	52.3%
true	ITP	28	4	128	10	0	0	1	74.9%
true	M	0	3	4	103	0	0	0	93.6%
true	OB	5	0	0	0	37	0	1	86.0%
true	P	1	5	2	1	0	145	0	94.2%
true	UB	3	0	1	0	1	0	40	88.9%
class recall		74.4%	60.7%	81.0%	86.6%	88.1%	94.8%	88.9%	
F1 score		77.2%	56.2%	77.8%	90.0%	87.1%	94.5%	88.9%	

Tabelle 10-33: Konfusionsmatrix: nach Merkmals-Auswahl (40 Merkmale gemäß MRMR-Algorithmus) und Hyperparameter Optimierung.

		Accuracy 82.9%		F1 Score 82.4%					
		pred.	pred.	pred.	pred.	pred.	pred.	pred.	class
		DC	DP	ITP	M	OB	P	UB	precision
true	DC	156	11	16	3	3	0	3	81.3%
true	DP	19	33	5	0	1	7	0	50.8%
true	ITP	26	5	129	10	0	0	1	75.4%
true	M	0	1	7	102	0	0	0	92.7%
true	OB	3	0	0	0	39	0	1	90.7%
true	P	1	3	2	0	0	148	0	96.1%
true	UB	3	0	1	0	1	0	40	88.9%
class recall		75.0%	62.3%	80.6%	88.7%	88.6%	95.5%	88.9%	
F1 score		78.0%	55.9%	77.9%	90.7%	89.7%	95.8%	88.9%	

Abbildung 10-10 zeigt einen Vergleich der F1 Scores aller Klassen für die drei aufgeführten Modelle. Die Verbesserungen aufgrund der Merkmalsextraktion und Hyperparameter betreffen in erster Linie die schwer zu trennenden Klassen DC, DP und ITP, bei denen die meisten Fehlklassifizierungen auftreten (jeweils circa +2-3 % F1 Score). Die F1 Scores für die Klassen P, OB, UB und M bleiben in etwa gleich.

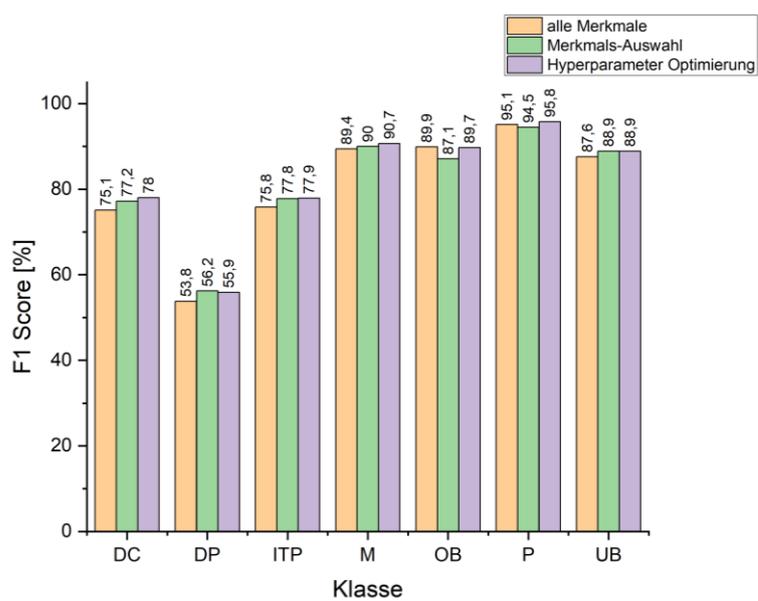


Abbildung 10-10: Gegenüberstellung des F1 Scores jeder Klasse für die drei verschiedenen Modelle.

10.10 Architekturen der verwendeten CNN

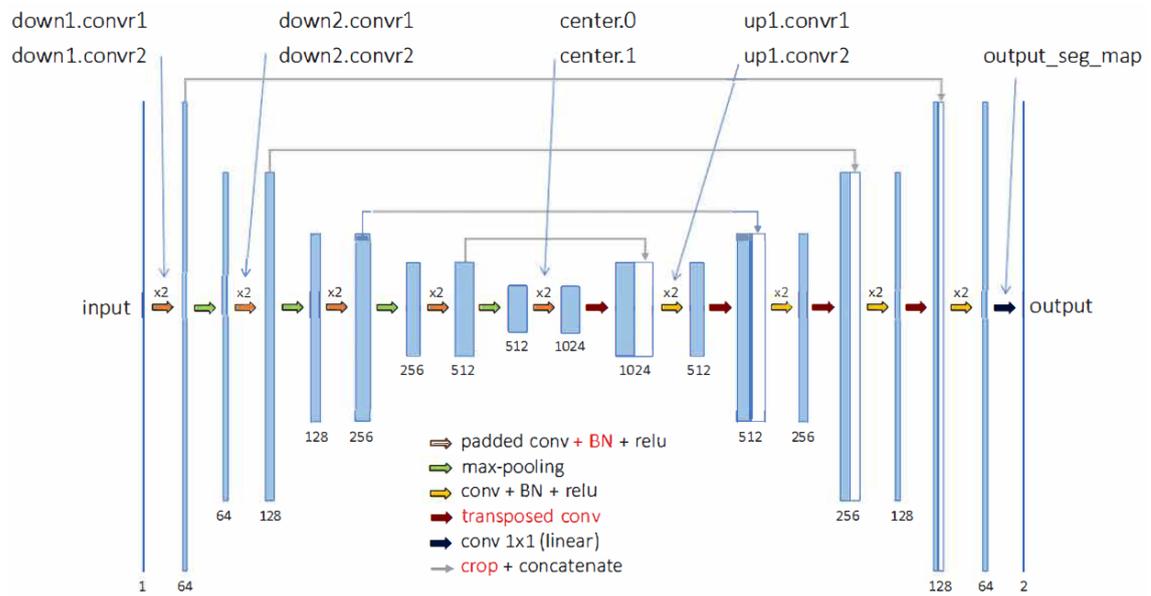


Abbildung 10-11: Schematische Darstellung des Vanilla U-Net, nach [207].

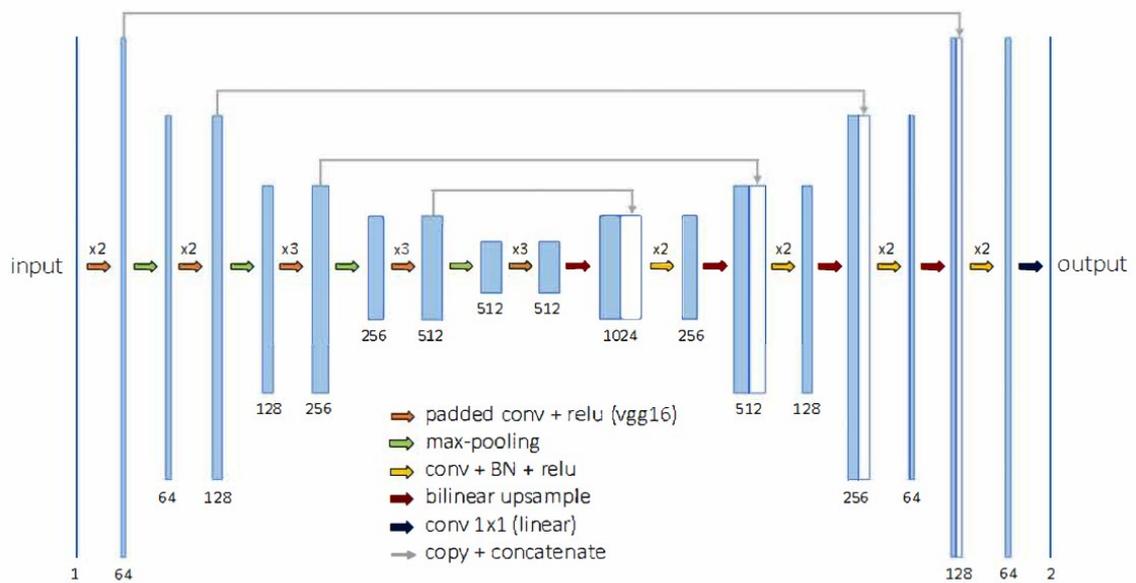


Abbildung 10-12: Schematische Darstellung des U-Net mit VGG16 Backbone, nach [207].

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1-1: Gefüge als Multiskalenspeicher, der chemische, kristallographische und geometrische Informationen über mehrere Skalen hinweg enthält. Das Gefüge speichert die Herstellungsgeschichte des Werkstoffs und bestimmt wiederum seine Eigenschaften. Bildquellen: * nach [1], ** modifiziert nach [2].	1
Abbildung 2-1: Metastabiles Eisen-Kohlenstoff-Diagramm (System Fe-Fe ₃ C), modifiziert nach [8].	5
Abbildung 2-2: Zweiphasenstahl: Perlitische Zweitphase Objekte (P) in einer Matrix aus polygonalem Ferrit (PF).	6
Abbildung 2-3: Kontinuierliches ZTU-Diagramm des Stahls 42CrMo4, modifiziert nach [7]: Bei langsamer, gleichgewichtsnaher Abkühlung bildet sich ein Ferrit-Perlit-Gefüge mit geringer Härte. Bei schnellerer Abkühlung werden die Umwandlungsbereiche von Bainit und Martensit durchlaufen, was zu höheren Härten führt. Legende: A = Austenit, F = Ferrit, P = Perlit, B = Bainit, M = Martensit. Gefügemengen sind in Prozent entlang der Abkühlkurven vermerkt.	7
Abbildung 2-4: (a) Martensitische Zweitphase Objekte (M) in der ferritischen Matrix eines Zweiphasenstahls. (b) Martensitisches Gefüge mit selbstangelassenen Bereichen, mit regelloser Anordnung der ausgeschiedenen Karbide (roter Pfeil).	9
Abbildung 2-5: Exemplarische bainitische Gefüge: (a) oberer Bainit, (b) unterer Bainit mit ca. 60° Vorzugsorientierung der Karbidausscheidungen, (c) granularer Bainit.	12
Abbildung 2-6: Schematische Darstellung einer selektiven Phasenätzung von Stahlgefügen [37].	18
Abbildung 2-7: Visualisierung der Bildregistrierung einer korrelativen Charakterisierung. (a) Originale LM-Aufnahme. (Detail-a) Invertierte LM-Aufnahme mit gemeinsamen Merkmalen zur REM-Aufnahme nach Anwendung von SIFT. (b) Originale REM-Aufnahme. (Detail-b) REM-Aufnahme mit gemeinsamen Merkmalen zur LM-Aufnahme nach Anwendung von SIFT. (c) LM und REM-Aufnahme, überlagert, nach Registrierung mittels bUnwarpJ.	22
Abbildung 2-8: Übersicht verschiedener Segmentierungsansätze mit jeweils einer beispielhaften Methode, basierend auf [71].	22
Abbildung 2-9: Visualisierung morphologischer Parameter. (a) linke Diagonale: Gefüge eines Zweiphasenstahls nach mod. Beraha Ätzung (Ferrit hell, C-reiche Zweitphase dunkel), rechte Diagonale: überlagertes Bild nach Schwellwert-Segmentierung. (b) Ausgewähltes Zweitphase Objekt nach Schwellwert-Segmentierung: Visualisierung morphologischer Parameter.	24
Abbildung 2-10: Schematische Darstellung der Berechnung der Gray-Level Co-Occurrence Matrix und Haralick Texturparameter: (a) vereinfachtes Graustufen-Bild mit drei Grauwerten. (b) numerische Darstellung: es wird gezählt, wie oft bestimmte Grauwert-Kombinationen nebeneinander liegen, hier die Grauwert-Kombination 1 neben 3, die zwei Mal vorliegt. (c) Diese Anzahl wird an die entsprechende Stelle der GLCM geschrieben. (d) dies wird für alle Grauwert-Kombinationen durchgeführt. Anschließend wird die GLCM normalisiert (e) und es können verschiedene Bildtexturparameter berechnet werden. Modifiziert nach [86].	25
Abbildung 2-11: Schematische Darstellung der Berechnung des Local Binary Pattern: (a), (b) originales Grauwert-Bild, in dem ein Pixel und seine acht umliegenden Nachbarpixel betrachtet werden. (c) zur Berechnung des LBP werden die Werte der Nachbarpixel mit dem Wert des zentralen Pixels verglichen. (d) Ist der Wert größer wird an die Stelle des Nachbarpixels eine Null geschrieben, ist er kleiner, dann eine Eins. (e) diese Folge von Nullen und Einsen wird als Binär-Zahlencode aufgeschrieben, der dann wiederum in eine Dezimalzahl umgerechnet wird. (f) Dieser Dezimalwert wird anschließend in der LBP-Matrix an die entsprechende Stelle des betrachteten zentralen Pixels geschrieben. Diese Berechnung erfolgt für jeden Pixel im Original-Bild. (g) als Ergebnis kann die LBP-Matrix als Histogramm dargestellt werden. Modifiziert nach [90].	26
Abbildung 2-12: Fragestellungen für das ML in der Bildverarbeitung, modifiziert nach [109].	29
Abbildung 2-13: Unterscheidung zwischen konventionellem ML und DL, modifiziert nach [117].	32

Abbildung 2-14: (a) Trennung der Datenpunkte in einer SVM mittels Hyperebene, nach [119]. (b) Kernel Trick der SVM, nach [121].	33
Abbildung 2-15: Schema eines Entscheidungsbaums, am Beispiel der Überlebenswahrscheinlichkeit von Reisenden auf der Titanic, modifiziert gemäß [122].	33
Abbildung 2-16: Schema eines CNN, nach [128].	36
Abbildung 2-17: (a) CNN zur Klassifizierung (VGG16), nach [129]. (b) CNN zur Segmentierung (U-Net), nach [130].	37
Abbildung 4-1: Zur Klassifizierung der Zweiphasenstähle berücksichtigte Gefügeklassen.	52
Abbildung 4-2: Aufgabestellungen der Segmentierung und Quantifizierung von Multiphasen-Stahlgefügen. (a) LM-Aufnahme. (b), (c) Unterschiedliche C-reiche Zweitphasen. (d) Segmentierung des lattenförmigen Bainits. (e) Unterscheidung von bainitischem und polygonalem Ferrit.	54
Abbildung 4-3: Temperatur-Zeit-Profile der Probenherstellung im Abschreckdilatometer. (a) kontinuierliche Abkühlung, (b) isotherme Umwandlung.	55
Abbildung 4-4: REM-Aufnahmen der isotherm umgewandelten Referenzproben. (a) vollständig oberer Bainit. (b) vollständig unterer Bainit.	56
Abbildung 5-1: Visualisierung der Unterschiede zwischen Bilder natürlicher Szenerien und Gefügaufnahmen sowie den bei materialwissenschaftlichen Fragestellungen zusätzlich zu berücksichtigenden Faktoren, nach [200].	61
Abbildung 5-2: Visualisierung der bei ML für materialwissenschaftliche Fragestellungen zusätzlich zu berücksichtigenden Faktoren, nach [211] und [200].	62
Abbildung 5-3: Darstellung des ganzheitlichen Ansatzes.	62
Abbildung 6-1: Visualisierung der korrelativen Charakterisierung. (a) korrelative LM-Aufnahme. (b) korrelative REM-Aufnahme. (c) korrelative EBSD-Messung mit KAM (links), IQ (mittig) und Grenzflächen (rechts). (d) Kombination von LM, REM und KAM in einem Bild zur Visualisierung der korrelativen Charakterisierung und dem Zusammenführen der Informationen aus unterschiedlichen Untersuchungsmethoden.	67
Abbildung 6-2: Experimenteller Ablauf der korrelativen Charakterisierung.	67
Abbildung 6-3: (a1, 2): Starker Kontrast der Zweitphase in der IQ: gemeinsame SIFT-Merkmale werden gefunden (gelbe Kreuze). (b1, 2): Schwächerer IQ-Kontrast der Zweitphase: nach modifizierter Beraha Ätzung werden keine SIFT-Merkmale gefunden. (c1, 2): Selbe Probenstelle wie (b1, 2): Durch die Korngrenzenkontrastierung nach Nital Ätzung werden SIFT-Merkmale gefunden. (d1, 2): Gemeinsame SIFT-Merkmale in Multiphasenstahlgefüge nach Nital Ätzung. Modifiziert nach [201].	68
Abbildung 6-4: Ablauf einer Registrierung von LM- und REM-Aufnahmen sowie EBSD-Karten: LM-Aufnahme (a) wird invertiert (b). SIFT-Merkmale in LM- und REM-Aufnahme (c), die mittels bUnwarpJ zur Registrierung der LM- auf die REM-Aufnahme genutzt werden (d). Über die Transformationsmatrix aus bUnwarpJ kann auch eine segmentierte LM-Aufnahme registriert werden (e). EBSD IQ (f) wird über SIFT und bUnwarpJ auf die auf die REM-Aufnahme registrierte LM-Aufnahme registriert (g). Über die Transformationsmatrix aus bUnwarpJ werden weitere EBSD-Karten ebenfalls registriert (h). Rot umrandet: Satz aufeinander registrierter Aufnahmen. Modifiziert nach [201].	70
Abbildung 6-5: jeweils REM-Aufnahme und Überlagerung von REM-Aufnahme mit EBSD Grenzflächen-Karte (Sub-Korngrenzen 2-5 °: rot, Kleinwinkelkorngrenzen 5-15 °: grün, Großwinkelkorngrenzen > 15 °: blau). (a) oberer Bainit. (b) Mischung aus oberem und unterem Bainit. (c) unterer Bainit. Modifiziert nach [200].	71
Abbildung 6-6: EBSD-Karten im Bildformat für weitere Quantifizierungen. (a) Korngrenzen- Karte (Grenzwinkel 5 °). (b) Karte der Korngrenzenarten: Sub-Korngrenzen (2-5 °, rot), Kleinwinkelkorngrenzen (5-15 °, grün) und Großwinkelkorngrenzen (> 15 °, blau).	73
Abbildung 6-7: Quantifizierung der KAM Werte in der Ferritmatrix um ein Zweitphase-Objekt. (a) Ausgangsobjekt. (b) Konvexe Hülle um das Ausgangsobjekt. (c) diese konvexe Hülle wird hochskaliert (Faktor 1,2). (d) von der hochskalierten konvexen Hülle wird das Ausgangsobjekte subtrahiert. Es verbleibt	

eine Maske, die lediglich die Objektumgebung erfasst. (e) diese Maske ermöglicht die Bestimmung der KAM Werte in der Ferritmatrix um das Objekt.....	74
Abbildung 6-8: Objektweise Quantifizierung der korrelativen Daten. (a) Satz registrierter Aufnahmen und Daten: segmentierte LM-Aufnahme, LM- und REM-Aufnahme sowie EBSD-Daten in Form eines multidimensionalen Daten-Arrays. Die segmentierte LM-Aufnahme wird zur Objektdefinition und objektweisen Quantifizierung genutzt. (b) Qualitative Auswertung: LM- oder REM-Aufnahme mit gewünschten EBSD-Karten überlagern. (c-e) Quantifizierung: auf LM-, REM- sowie EBSD-Datenebene können eine Vielzahl an Gefügemerkmalen erhoben werden. Maßstabsbalken werden der Übersichtlichkeit wegen nicht dargestellt. Modifiziert nach [201].	75
Abbildung 6-9: Visualisierung geeigneter Parameter zur Unterscheidung von bainitischem und polygonalem Ferrit und deren Unterschiede am Beispiel von je einem Objekt bainitischen sowie polygonalen Ferrits.	75
Abbildung 7-1: Auswertung des Ringversuches: Gefügaufnahmen, bei denen sich die Experten überwiegend einig waren.	80
Abbildung 7-2: Auswertung des Ringversuches: Gefügaufnahmen, bei denen sich die Experten uneinig waren.	81
Abbildung 7-3: Missorientierungswinkelverteilungen der EBSD-Messung der isotherm umgewandelten Proben. (a): Umwandlung bei 525 °C: Hoher Anteil an Missorientierungen < 20 ° und geringer Anteil an Missorientierungen > 50 °, was dem typischen Erscheinungsbild von oberem Bainit entspricht (siehe 2.1.1). (b) Umwandlung bei 425 °C: Geringer Anteil an Missorientierungen < 20 ° und hoher Anteil an Missorientierungen > 50 °, was dem typischen Erscheinungsbild von unterem Bainit entspricht (siehe 2.1.1).	83
Abbildung 7-4: Korrelative Aufnahmen REM + EBSD, nach Registrierung, der bei 525 °C isotherm umgewandelten Probe. (a) REM. (b) REM überlagert mit EBSD IPF-Karte. (c) REM überlagert mit EBSD Grenzflächen-Karte. (d) REM überlagert mit EBSD KAM-Karte. Detailausschnitte vergrößert in Abbildung 7-5.	84
Abbildung 7-5: (D1) Detailausschnitt 1 aus Abbildung 7-4 (a)-(d). (D2) Detailausschnitt 2 aus Abbildung 7-4 (a)-(d).	84
Abbildung 7-6: Korrelative Aufnahmen REM + EBSD, nach Registrierung, der bei 425 °C isotherm umgewandelten Probe. (a) REM. (b) REM überlagert mit EBSD IPF-Karte. (c) REM überlagert mit EBSD Grenzflächen-Karte. (d) REM überlagert mit EBSD KAM-Karte. Detailausschnitte vergrößert in Abbildung 7-7.	85
Abbildung 7-7: (D1) Detailausschnitt 1 aus Abbildung 7-6 (a)-(d). (D2) Detailausschnitt 2 aus Abbildung 7-6 (a)-(d).	86
Abbildung 7-8: Zweitphase Objekt der Klasse Perlit. REM (a) und Überlagerungen aus REM mit Unique Grain Color (UGC)-Karte (b), Inverse Pol Figure (IPF)-Karte (c), Grenzflächen-Karte (d) und KAM-Karte (e).	88
Abbildung 7-9: Zweitphase Objekte der Klasse degenerierter Perlit. REM (a1,2) und Überlagerungen aus REM mit UGC-Karte (b1,2), IPF- Karte (c1,2), Grenzflächen-Karte (d1,2) und KAM-Karte (e1,2).	89
Abbildung 7-10: Kleine Zweitphase Objekte der Klasse Zementit-Bruchstücke. REM (a1,2) und Überlagerungen aus REM mit UGC-Karte (b1,2), IPF-Karte (c1,2), Grenzflächen-Karte (d1,2) und KAM-Karte (e1,2).	89
Abbildung 7-11: Größere Zweitphase Objekte der Klasse Zementit-Bruchstücke. REM (a1,2) und Überlagerungen aus REM mit UGC-Karte (b1,2), IPF-Karte (c1,2), Grenzflächen-Karte (d1,2) und KAM-Karte (e1,2).	90
Abbildung 7-12: Zweitphase Objekt der Klasse ITP. REM (a1,2) und Überlagerungen aus REM mit UGC-Karte (b1,2), Grenzflächen-Karte (c1,2) und KAM-Karte (d1,2).	91
Abbildung 7-13: Überlagerungen aus REM mit EBSD-Phasen-Karte. Ferritische Bereiche sind rot, austenitische Bereiche grün gekennzeichnet. Aufgrund der Schrittweite von 0,35 µm bei der EBSD-Messung werden die austenitischen Bereiche nur begrenzt erkannt.	91

Abbildung 7-14: Größere Zweitphase Objekt der Klasse Martensit. REM (a) und Überlagerungen aus REM UGC-Karte (b), IPF-Karte (c), Grenzflächen-Karte (d) und KAM-Karte (e).	92
Abbildung 7-15: Kleinere Zweitphase Objekt der Klasse Martensit. REM (a) und Überlagerungen aus REM mit UGC-Karte (b), Grenzflächen-Karte (c) und KAM-Karte (d).	92
Abbildung 7-16: Zweitphase Objekt der Klasse oberer Bainit. REM (a) und Überlagerungen aus REM mit UGC-Karte (b), IPF-Karte (c), Grenzflächen-Karte (d) und KAM-Karte (e).	93
Abbildung 7-17: Zweitphase Objekt der Klasse unterer Bainit. REM (a) und Überlagerungen aus REM mit UGC-Karte (b), IPF-Karte (c), Grenzflächen-Karte (d) und KAM-Karte (e).	94
Abbildung 7-18: Zweitphase Objekt mit Bereichen von oberem und unterem Bainit. REM (a) und Überlagerungen aus REM mit UGC-Karte (b), IPF-Karte (c), Grenzflächen-Karte (d) und KAM-Karte (e).	94
Abbildung 7-19: (a) größeres Zweitphase-Objekt, das Strukturen von OB und UB aufweist. (b) aus diesem Objekt manuell zugeschnittene klare OB- und UB-Strukturen. (c) separate OB- und UB-Objekte, aus denen Gefügemerkmale extrahiert und dem existierenden Datensatz hinzugefügt werden.	95
Abbildung 7-20: Auswahl an Fehlklassifizierungen.	100
Abbildung 7-21: REM-Aufnahme der Probe 01543 (0.25), original und überlagert mit dem farbigen Klassifizierungsergebnis gemäß Legende.	110
Abbildung 7-22: REM-Aufnahme der Probe Z518B (0.5-3_2,1), original und überlagert mit dem farbigen Klassifizierungsergebnis.	111
Abbildung 7-23: Zu Tabelle 7-6 zugehörige Gefügaufnahmen der Zweitphase Objekte.	112
Abbildung 7-24: Werteverteilung des Confidence Index der Klassifizierungen der perlitischen Probe (a) und der bainitischen Probe (b).	112
Abbildung 7-25: Auftragung des Confidence Index gegen die Fläche für jedes Zweitphase Objekt. (a) perlitische Probe, (b) bainitische Probe.	113
Abbildung 7-26: Bainitisches Zweitphase Objekte mit charakteristischen Gefügemerkmalen von OB und UB und den vorhergesagten Wahrscheinlichkeiten jeder Gefügekategorie.	114
Abbildung 7-27: Anhand der Klassifizierung berechnete Phasenanteile der perlitischen Probe (a) und der bainitischen Probe (b). Der blaue Balken stellt den Mittelwert der drei verwendeten ML-Modelle dar, die Fehlerbalken Minima und Maxima. Der rote Punkt stellt den Phasenanteil basierend auf dem Mehrheitsentscheid dar.	115
Abbildung 7-28: Großes Zweitphase Objekt, das nach der probabilistischen Klassifizierung als unsichere Vorhersage eingestuft wurde, weil es Strukturen aus mehreren Klassen enthält. Durch die automatische Aufteilung des Bildes in Teilbilder wird eine genauere und differenziertere Klassifizierung erreicht. ...	116
Abbildung 8-1: Visualisierung des Annotationsprozesses mit Hilfe korrelativer EBSD-Aufnahmen. (a) LM-Aufnahme. (b)-(e) Überlagerung der LM-Aufnahme mit EBSD Grenzflächen-Karte, UGC-Karte, KAM-Karte und GOS-Karte. (f) annotierte Bereiche lattenförmigen Bainits basierend auf EBSD-Karten. (g)-(j) Detail D1 zeigt, wie über Korn- und Korngrenzendarstellungen unklare Objektgrenzen klar erfasst werden können. (k)-(n) Detail D2 zeigt, wie polygonale Ferrit Körner entlang oder innerhalb der Bainit Bereiche mit Hilfe von Missorientierungsparametern identifiziert werden können, nach [207].	121
Abbildung 8-2: Veranschaulichung des Einflusses des down-scaling auf Anzahl und Kontext der generierten Bildausschnitte. Im Vergleich zum direkten tiling werden aufgrund des down-scaling weniger Bildausschnitte erzeugt (4 vs. 16), die dafür aber mehr Bild-Kontext im Sinne eines größeren Betrachtungsbereich enthalten.	124
Abbildung 8-3: LM- und REM-Aufnahmen überlagert mit der Segmentierung des lattenförmigen Bainits für verschiedene Modelle. a) und b) die besten zufällig initialisierten Vanilla U-Nets (Modelle 1,7). c) und d) die besten zufällig initialisierten VGG16 U-Nets (Modelle 4, 10). e) und f) die besten auf ImageNet vortrainierten VGG16 U-Nets (Modelle 3, 9), nach [207].	127
Abbildung 8-4: Grad-CAM Aktivierungs-Karten zur Visualisierung des Netzwerk-Entscheidungsfindungsprozesses. (a) LM-Aufnahme mit überlagerter Annotation. (b)-(i) Relevante	

Bereiche zur Erkennung des Hintergrunds. (j)-(l) Relevante Bereiche zur Erkennung des lattenförmigen Bainit. Weiße Beschriftung = Modell 1 (Vanilla U-Net), schwarze Beschriftung = Modell 3 (VGG16 U-Net). Modifiziert nach [207].	131
Abbildung 8-5: Network Dissection Auswertung zur Visualisierung des Netzwerk-Entscheidungsfindungsprozesses. Modifiziert nach [207].	132
Abbildung 8-6: Generierung der Trainingsdaten: (a) die LM-Aufnahme wird mit geeigneten EBSD-Karten überlagert. (b), (c) in den Überlagerungen werden Referenzbereiche von bainitischem und polygonalem Ferrit markiert (schwarze Pixel). Aus diesen Bereichen werden EBSD-Daten extrahiert als Trainingsdaten für das ML-Modell. (d) Unterscheidung von bainitischem und polygonalem Ferrit durch das ML-Modell.	136
Abbildung 8-7: Iterativer Trainingsprozess eines ML-Modells zur Unterscheidung von bainitischem und polygonalem Ferrit.	136
Abbildung 8-8: Post-processing der pixelweisen Klassifizierung. (a) nach der pixelweisen Klassifizierung können Körner sowohl als bainitischer Ferrit als auch als polygonaler Ferrit klassifizierte Pixel enthalten. (b) objektweise Betrachtung mit Hilfe der EBSD-Korngrenzenkarte und Durchführung eines Mehrheitsentscheids. (c) Nach dem Mehrheitsentscheid enthält jedes Korn entweder nur bainitischen oder polygonalen Ferrit.	138
Abbildung 8-9: (a) LM-Aufnahme einer vollbainitischen Probe, überlagert mit BF/PF Klassifizierung: die Probe wird korrekt als 100 % BF klassifiziert. (b) IQ-Karte des PF-Referenzzustandes, überlagert mit BF/PF Klassifizierung: die Probe wird korrekt als 100 % PF klassifiziert (in diesem Beispiel wurde keine korrelative LM-Aufnahme erzeugt).	138
Abbildung 8-10: (a) LM-Aufnahme von Probe M890. (b) Überlagerung LM mit BF (grün)/ PF (blau) Klassifizierung: das Ergebnis erscheint plausibel und entspricht dem Expertenkonsens. (c) Detailausschnitt aus (b).	139
Abbildung 8-11: (a) LM-Aufnahme von Probe 1053. (b) Überlagerung LM mit BF (grün)/ PF (blau) Klassifizierung: das Ergebnis erscheint plausibel und entspricht dem Expertenkonsens. (c) Detailausschnitt aus (b).	139
Abbildung 8-12: Robustheit des Klassifizierungsmodells gegenüber Messartefakten. (a) IQ und KAM-Karte einer unzureichend präparierten Probe: mehrere Kratzer sind deutlich sichtbar. (b) Detail aus (a): ein Kratzer verläuft direkt durch ein PF-Korn (schwarzer Kreis). (c) Korrelative REM-Aufnahme, überlagert mit der BF/PF Klassifizierung: die Klassifizierung wird durch die Kratzer nicht negativ beeinflusst, das PF-Korn wird korrekt erkannt.	141
Abbildung 8-13: (a) Überlagerung aus LM und EBSD-Karten. PF-Bereiche wurden basierend auf der BF/PF-Klassifizierung entfernt. (b) Durch Filtern nach bspw. Kornform, Missorientierung oder Grenzflächenarten können IF-Objekte identifiziert werden.	143
Abbildung 8-14: IF/LF/PF Klassifizierung der Probe 148 (vollbainitisch). IF = rot, LF = grün.	144
Abbildung 8-15: IF/LF/PF Klassifizierung der Probe M890 (Position 3). IF = rot, LF = grün, PF = blau.	144
Abbildung 8-16: Separate Gefügequantifizierung von BF- (grün) und PF-Bereichen (blau). (a) Überlagerung LM-Aufnahme mit Ergebnisbild. (b) Aufteilung des Ergebnisbildes in BF- und PF-Bereiche. (c) Separate Quantifizierung der BF- und PF-Bereiche, z.B. Bestimmung der Korngrößenverteilung.	146
Abbildung 8-17: Merkmals-Ranking des Regressionsmodells zur Vorhersage der Härte der ATP-Proben.	147
Abbildung 8-18: Links: Referenzen der EBSD-basierten pixelweisen BF/PF Klassifizierung. Rechts: korrespondierende Ergebnisse der konventionellen LM-Auswertung: Übereinstimmungen werden hell, Abweichungen dunkel dargestellt.	149
Abbildung 8-19: Ergebnisse der Vorversuche der DL-Segmentierung von BF und PF in LM-Aufnahmen. Links: Originale LM-Aufnahme. Mittig: EBSD-basierte Klassifizierung als Grundwahrheit für die DL-Segmentierung (gemäß 8.3.2, die Morphologie der Phasen erscheint etwas „rundlich“ durch die	

Binärbildnachbearbeitung (post-processing gemäß 8.3.2 und area-opening). Rechts: DL-Segmentierung. 151

Abbildung 10-1: Klassifizierungsschema nach Bramfitt et al., modifiziert nach [20]. III

Abbildung 10-2: LM-Aufnahme eines ferrit-perlitischen Zweiphasenstahls mit vergrößerten REM-Aufnahmen einzelner Zweitphase-Objekte. Perlit liegt überwiegend regulär vor, vereinzelt auch degeneriert. XIX

Abbildung 10-3: LM-Aufnahme eines ferrit-bainitischen Zweiphasenstahls mit vergrößerten REM-Aufnahmen einzelner Zweitphase-Objekte. Die bainitischen Bestandteile lassen sich den Arten Zementit-Bruchstücke, Produkte unvollständiger Umwandlung und degenerierter Perlit zuordnen..... XIX

Abbildung 10-4: LM-Aufnahme eines ferrit-bainitischen Zweiphasenstahls mit vergrößerten REM-Aufnahmen einzelner Zweitphase-Objekte. Die bainitischen Bestandteile lassen sich den Arten oberer und unterer Bainit sowie Zementit-Bruchstücke und Produkte unvollständiger Umwandlung zuordnen.XX

Abbildung 10-5: LM-Aufnahme eines ferrit-bainitischen Zweiphasenstahls mit vergrößerten REM-Aufnahmen einzelner Zweitphase-Objekte.....XX

Abbildung 10-6: Datenaufbereitung für Registrierung: Listendarstellung der EBSD-Parameter wird in eine Matrixdarstellung überführt und alle Parameter in einem multidimensionalen Array gespeichert. Aus diesem Array werden die IQ-Werte als Grauwertbild exportiert. XXII

Abbildung 10-7: Auswerte-Workflow der EBSD-Quantifizierung („Variante 2“).XXIII

Abbildung 10-8: (a) REM-Aufnahme. (b) Korrelative LM-Aufnahme. (c) Segmentierte LM-Aufnahme: dient der Definition und separaten Extraktion der Zweitphase Objekte (d) Maskierte REM-Aufnahme: lediglich die Zweitphase Objekte verbleiben im Bild. (e) Graustufenbild des Objektes in der REM-Aufnahme: dient der Auswertung der Bildtextur der Substruktur. (f) binarisiertes Bild aus (e): dient der Auswertung der Morphologie der Substruktur. (f) Objekt in der LM-Aufnahme: dient der Auswertung der Objekt-Morphologie.XXV

Abbildung 10-9: Gegenüberstellung des F1 Scores jeder Klasse für die vier verschiedenen Sampling-Strategien.XXXI

Abbildung 10-10: Gegenüberstellung des F1 Scores jeder Klasse für die drei verschiedenen Modelle. XXXV

Abbildung 10-11: Schematische Darstellung des Vanilla U-Net, nach [207].XXXVI

Abbildung 10-12: Schematische Darstellung des U-Net mit VGG16 Backbone, nach [207].XXXVI

Tabellenverzeichnis

Tabelle 2-1: Bainitarten gemäß Schema nach Zajac [10].	13
Tabelle 2-2: Umwandlungsprodukte im granularen Bainit gemäß Schema nach Zajac [10].	14
Tabelle 2-3: EBSD-basierte Klassifizierung von unterem, oberem und granularem Bainit gemäß Schema nach Zajac [10,23].	15
Tabelle 2-4: Qualitative Beschreibung verschiedener Ferritarten in Multiphasenstählen.	16
Tabelle 2-5: Schematische Konfusionsmatrix.	31
Tabelle 4-1: Chemische Zusammensetzung in Gew.-% des zur Herstellung der Referenzproben verwendeten Stahls. Aufgrund von Geheimhaltungsvereinbarungen können die exakten Gehalte der Mikrolegierungselemente nicht angegeben werden.	54
Tabelle 4-2: Vorliegende Gefügebestandteile in den Referenzproben nach kontinuierlicher Abkühlung.	55
Tabelle 4-3: Vorliegende Gefügebestandteile in den Referenzproben nach isothermer Umwandlung.	56
Tabelle 4-4: Schritte der Probenpräparation.	57
Tabelle 6-1: Liste extrahierter Parameter der pixelweisen- und objektweisen Auswertung.	76
Tabelle 7-1: Kennzahlen des Datensatzes des vorherigen Promotionsvorhabens [187].	82
Tabelle 7-2: Für die korrelative Charakterisierung verwendete Proben (Zweiphasenstähle aus industrieller Produktion) und deren Gefügebestandteile.	87
Tabelle 7-3: Klassenverteilung im fertig annotierten Datensatz.	96
Tabelle 7-4: Konfusionsmatrix des finalen Modells, evaluiert am Testsatz.	99
Tabelle 7-5: Merkmals-Ranking des finalen Modells gemäß MRMR-Algorithmus.	102
Tabelle 7-6: Ausgewählte Vorhersagen und Vorhersagewahrscheinlichkeiten der drei Modelle und des Mehrheitsentscheiders bei der perlitischen Probe.	112
Tabelle 7-7: Anteile unsicher klassifizierter Zweitphase Objekte in der perlitischen und bainitischen Probe, bezogen auf Anzahl und Fläche.	113
Tabelle 7-8: Phasenanteile der perlitischen und bainitischen Probe, basierend auf dem Mehrheitsentscheid der drei ML-Modelle.	115
Tabelle 8-1: Kenngrößen der annotierten Datensätze.	122
Tabelle 8-2: Für den Datensatz zur BF/PF Unterscheidung verwendete Proben und deren Gefüge.	122
Tabelle 8-3: Finale vier Datensätze nach Datenvorbereitung.	124
Tabelle 8-4: Unterschiede zwischen Vanilla U-Net und VGG16 U-Net.	125
Tabelle 8-5: IoU für verschiedene U-Net basierte Modelle zur Segmentierung der LM-Aufnahmen.	126
Tabelle 8-6: IoU für verschiedene U-Net basierte Modelle zur Segmentierung der REM-Aufnahmen.	126
Tabelle 8-7: Merkmals-Ranking der pixelweisen Klassifizierung basierend auf MRMR-Algorithmus.	142
Tabelle 8-8: Konfusionsmatrix der IF/LF/PF Klassifizierung.	143
Tabelle 8-9: Merkmals-Ranking der objektweisen Klassifizierung von IF, LF, PF basierend auf MRMR-Algorithmus.	145
Tabelle 8-10: Klassifizierungsgenauigkeiten (25 % Holdout-Validierung) der jeweiligen Modelle zur konventionellen BF/PF Unterscheidung in LM-Aufnahmen.	148
Tabelle 8-11: Abweichungen der Phasenanteile zwischen EBSD-basierter Referenz und konventioneller LM-Auswertung.	150
Tabelle 10-1: Klassifizierungsschema nach Ohmori et al. [26].	II
Tabelle 10-2: Klassifizierungsschema nach Reynolds et al. [27].	III
Tabelle 10-3: Klassifizierungsschema nach ISIJ für die ferritische Phase, modifiziert nach [170].	IV
Tabelle 10-4: Klassifizierungsschema nach ISIJ für die C-reiche Zweitphase, modifiziert nach [170].	V

Tabelle 10-5: Klassifizierungsschema nach Lotter et al. [29]..... V

Tabelle 10-6: Klassifizierungsschema nach Krauss et al. [30]. V

Tabelle 10-7: Klassifizierungsschema nach Thewlis et al. [31]..... VI

Tabelle 10-8: Bainitarten gemäß Schema nach Zajac [10]. VIII

Tabelle 10-9: Umwandlungsprodukte im granularen Bainit gemäß Schema nach Zajac [10]. VIII

Tabelle 10-10: EBSD-basierte Klassifizierung von unterem, oberem und granularem Bainit gemäß Schema nach Zajac [10,23]. IX

Tabelle 10-11: Klassifizierungsschema nach Smirnov et al. [32]. X

Tabelle 10-12: Klassifizierungsschema nach Gerdemann und Song [12,24]. XI

Tabelle 10-13: Klassifizierungsschema für Multiphasenstähle des Micro-quant, gemäß [3] (Tabelle 2.6). XII

Tabelle 10-14: morphologische und kristallographische Charakteristika der ferritischen Phase [3] (Tabelle 2.2). XII

Tabelle 10-15: morphologische und kristallographische Charakteristika der C-reichen Zweitphase [3] (Tabelle 2.3). XIV

Tabelle 10-16: Klassifizierungsschema nach Matrosov et al. für die kohlenstoffarme Matrix-Phase, nach [25]. XV

Tabelle 10-17: Klassifizierungsschema nach Matrosov et al. für die kohlenstoffreiche Zweitphase, nach [25]. XV

Tabelle 10-18: Aus den Gefügaufnahmen extrahierte Merkmale der Zweitphase-Objekte für die ML-Klassifizierung. Blau = die 72 nach dem Entfernen korrelierender Parameter verbleibenden Merkmale. Blaue, fette Schrift = die 40 Merkmale des finalen Modells nach der Merkmalsauswahl. XXVII

Tabelle 10-19: Konfusionsmatrix der Referenz: der gesamte unausgewogene Datensatz wurde verwendet. XXX

Tabelle 10-20: Konfusionsmatrix des under-sampling: nur die Anzahl der Objekte der kleinsten Klasse berücksichtigt (jeweils 212 Objekte pro Klasse). XXX

Tabelle 10-21: Konfusionsmatrix des over-sampling: Datenpunkte unterrepräsentierter Klassen werden doppelt verwendet, kombiniert mit einem under-sampling der weiterhin überrepräsentierten Klassen (jeweils 424 Objekte pro Klasse). XXXI

Tabelle 10-22: Konfusionsmatrix nach SMOTE: Anzahl der Objekte für jede Klasse wird auf die Anzahl der größten Klasse erhöht (jeweils 964 Objekte pro Klasse), Verwendung der Standardparameter (k=5). XXXI

Tabelle 10-23: Klassifizierungsstrategie 1: alle sieben Klassen werden auf einmal klassifiziert. XXXII

Tabelle 10-25: Klassifizierungsstrategie 2: hierarchische Klassifizierung. XXXII

Tabelle 10-27: Klassifizierungsstrategie 3: hierarchische Klassifizierung. XXXII

Tabelle 10-29: Klassifizierungsstrategie 4: hierarchische Klassifizierung. XXXII

Tabelle 10-24: Konfusionsmatrix der Klassifizierungsstrategie 1. XXXIII

Tabelle 10-26: Konfusionsmatrix der Klassifizierungsstrategie 2. XXXIII

Tabelle 10-28: Konfusionsmatrix der Klassifizierungsstrategie 3. XXXIII

Tabelle 10-30: Konfusionsmatrix der Klassifizierungsstrategie 4. XXXIII

Tabelle 10-31: Konfusionsmatrix: alle Merkmale, keine Hyperparameter Optimierung. XXXIV

Tabelle 10-32: Konfusionsmatrix: nach Merkmals-Auswahl (40 Merkmale gemäß MRMR-Algorithmus), keine Hyperparameter Optimierung. XXXIV

Tabelle 10-33: Konfusionsmatrix: nach Merkmals-Auswahl (40 Merkmale gemäß MRMR-Algorithmus) und Hyperparameter Optimierung. XXXIV

Literaturverzeichnis

- [1] Umformen | Kühlung von Stahl im mathematischen Modell | springerprofessional.de, <https://www.springerprofessional.de/umformen/werkstoffpruefung---materialanalyse/kuehlung-von-stahl-im-mathematischen-modell/15848124> (accessed February 3, 2023).
- [2] Umformen Allgemein - Technikdoku, <https://technikdoku.com/umformen-allgemein/> (accessed February 3, 2023).
- [3] M.P. Aarnts, R.A. Rijkenberg, F.A. Twisk, Microstructural quantification of multi-phase steels (Micro-quant), 2011. <https://doi.org/10.2777/83656>.
- [4] M. Larmuseau, M. Sluydts, K. Theuwissen, L. Duprez, T. Dhaene, S. Cottenier, Compact representations of microstructure images using triplet networks, *Npj Comput. Mater.* 6 (2020). <https://doi.org/10.1038/s41524-020-00423-2>.
- [5] Home page - worldsteel.org, <https://worldsteel.org/> (accessed February 3, 2023).
- [6] W. Dahl, *Eigenschaften und Anwendungen von Stählen - Band 1: Grundlagen*, 1st ed., Verlag der Augustinus Buchhandlung, Aachen, 1993.
- [7] H. Berns, W. Theisen, *Eisenwerkstoffe – Stahl und Gusseisen*, 3rd ed., Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2006.
- [8] H.-J. Bargel, G. Schulze, *Werkstoffkunde*, 9th ed., Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2005.
- [9] H.K.D.H. Bhadeshia, R. Honeycombe, *Steels - Microstructure and Properties*, 3rd ed., Elsevier Ltd., 2006.
- [10] S. Zajac, V. Schwinn, K.H. Tacke, Characterisation and Quantification of Complex Bainitic Microstructures in High and Ultra-High Strength Linepipe Steels, *Mater. Sci. Forum.* 500–501 (2005) 387–394. <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/MSF.500-501.387>.
- [11] H.K.D.H. Bhadeshia, The bainite transformation: unresolved issues, *Mater. Sci. Eng. A.* 273–275 (1999) 58–66. [https://doi.org/10.1016/S0921-5093\(99\)00289-0](https://doi.org/10.1016/S0921-5093(99)00289-0).
- [12] F.L.H. Gerdemann, W. Bleck, *Bainite in medium carbon steels*, Shaker, 2010. <https://doi.org/999910017818>.
- [13] H.I. Aaronson, G. Spanos, W.T. Reynolds, A progress report on the definitions of bainite, *Scr. Mater.* 47 (2002) 139–144. [https://doi.org/10.1016/S1359-6462\(02\)00119-7](https://doi.org/10.1016/S1359-6462(02)00119-7).
- [14] L. Fielding, The Bainite Controversy, *Mater. Sci. Technol.* 29 (2013) 383–399. <https://doi.org/10.1179/1743284712Y.0000000157>.
- [15] H.K.D.H. Bhadeshia, D. V. Edmonds, The mechanism of bainite formation in steels, *Acta Metall.* 28 (1980) 1265–1273. [https://doi.org/10.1016/0001-6160\(80\)90082-6](https://doi.org/10.1016/0001-6160(80)90082-6).
- [16] H.I. Aaronson, W.T. Reynolds, G.J. Shiflet, G. Spanos, Bainite viewed three different ways, *Metall. Trans. A.* 21 (1990) 1343–1380. <https://doi.org/10.1007/BF02672557>.
- [17] H.K.D.H. Bhadeshia, *Bainite in steels*, 3rd ed., Maney Publishing, 2015.
- [18] H.K.D.H. Bhadeshia, New bainitic steels by design, *Proc. 1996 Int. Conf. Displac. Phase Transform. Their Appl. Mater. Eng.* (1998) 69–78.
- [19] H.I. Aaronson, The Mechanism of Phase Transformations in Crystalline Solids, in: *Proc. an Int.*

- Symp. Organ. by Inst. Met. - Monogr. Rep. Ser. No. 33, The Institute of Metals, London, 1969.
- [20] B.L. Bramfitt, J.G. Speer, A perspective on the morphology of bainite, *Metall. Trans. A.* 21 (1990) 817–829. <https://doi.org/10.1007/BF02656565>.
- [21] DIN EN 10027-1 - 2017-01 - Beuth.de, <https://www.beuth.de/de/norm/din-en-10027-1/262540217> (accessed February 3, 2023).
- [22] DIN EN 10020 - 2000-07 - Beuth.de, <https://www.beuth.de/de/norm/din-en-10020/27404233> (accessed February 3, 2023).
- [23] S. Zajac, J. Komenda, P. Morris, P. Dierickx, S. Matera, F. Penalba Diaz, Quantitative structure-property relationships for complex bainitic microstructures, 2005. <https://publications.europa.eu/en/publication-detail/-/publication/22f902b8-37e3-4fa1-86fe-5876e4974329>.
- [24] W. Song, Characterization and simulation of bainite transformation in high carbon bearing steel 100Cr6, RWTH Aachen, Germany, 2014.
- [25] M.Y. Matrosov, I. V. Lyasotskii, A.A. Kichkina, D.L. D'yakonov, A.A. Efimov, Microstructure in low-carbon low-alloy high-strength pipe steel, *Steel Transl.* 42 (2012) 84–93. <https://doi.org/10.3103/S0967091212010135>.
- [26] Y. Ohmori, H. Ohtani, T. Kunitake, The Bainite in Low Carbon Low Alloy High Strength Steels, *Tetsu-to-Hagane.* 57 (1971) 1690–1705. https://doi.org/10.2355/tetsutohagane1955.57.10_1690.
- [27] W.T. Reynolds, H.I. Aaronson, G. Spanos, A Summary of the Present Diffusionist Views on Bainite, *Mater. Trans. JIM.* 32 (1991) 737–746. <https://doi.org/10.2320/matertrans1989.32.737>.
- [28] T. Araki, Atlas for bainitic microstructures, Bainite committee of Iron & Steel Institute of Japan, 1992.
- [29] U. Lotter, H.P. Hougardy, Kennzeichnung des Gefüges Bainit, *Prakt. Metallogr.* 29 (1992) 151–157.
- [30] G. Krauss, S.W. Thompson, Ferritic Microstructures in Continuously Cooled Low- and Ultralow-carbon Steels., *ISIJ Int.* 35 (1995) 937–945. <https://doi.org/10.2355/isijinternational.35.937>.
- [31] G. Thewlis, Classification and quantification of microstructures in steels, *Mater. Sci. Technol.* 20 (2004) 143–160. <https://doi.org/10.1179/026708304225010325>.
- [32] M.A. Smirnov, I.Y. Pyshmintsev, A.N. Boryakova, Classification of low-carbon pipe steel microstructures, *Metallurgist.* 54 (2010) 444–454. <https://doi.org/10.1007/s11015-010-9321-2>.
- [33] D. Britz, Y. Steimer, F. Mücklich, A New Approach for Color Metallography: Through Controlled Conditions to Objective Microstructure Analysis of Low-Carbon Steels by LePera-Etching, in: 100 Years E04 Dev. Metallogr. Stand., ASTM International, 2019: pp. 130–151. <https://doi.org/https://doi.org/10.1520/stp160720170242>.
- [34] D. Britz, A. Hegetschweiler, M. Roberts, F. Mücklich, Reproducible Surface Contrasting and Orientation Correlation of Low-Carbon Steels by Time-Resolved Beraha Color Etching, *Mater. Perform. Charact.* 5 (2016) 553–563. <https://doi.org/10.1520/MPC20160067>.
- [35] E. Macherauch, H.-W. Zoch, *Praktikum in Werkstoffkunde*, 11th ed., Vieweg+Teubner Verlag, Springer Fachmedien Wiesbaden GmbH, 2011.

- [36] G. Petzow, *Metallographisches, Keramographisches, Plastographisches Ätzen - Eisen Stahl und Gusseisen*, Gebrüder Borntraeger, Berlin - Stuttgart, 1994.
- [37] E. Füreder, *Metallkundliche Charakterisierung von modernen niedriglegierten, bainitischen Stählen*, Ruhr-Universität Bochum, 2010. <https://hss-opus.ub.ruhr-uni-bochum.de/opus4/frontdoor/index/index/docId/2372>.
- [38] H. Oettel, H. Schumann, *Metallografie*, Wiley-VCH, Weinheim, 2011.
- [39] D. Britz, *Stahlgefüge besser verstehen – Kontrastierung, Bildanalyse und Klassifizierung niedriglegierter Stähle*, Saarländische Universitäts- und Landesbibliothek, 2018. <https://doi.org/10.22028/D291-28021>.
- [40] B. L. Bramfitt, A. o. Benschoter, *Metallographer 's Guide - Practices and Procedures for Irons and Steels*, 2002.
- [41] D.N. Hawkins, An etchant for revealing the substructure in low-carbon steels, *Metallography*. 14 (1981) 61–68. [https://doi.org/10.1016/0026-0800\(81\)90020-3](https://doi.org/10.1016/0026-0800(81)90020-3).
- [42] H. Klemm, Anwendung des Natriumthiosulfat-Verfahrens (KLEMM'sche Ätzung), *Pract. Metallogr.* 5 (1968) 163–177.
- [43] F.S. LePera, Improved Etching Technique to Emphasize Martensite and Bainite in High-Strength Dual-Phase Steel, *Jom*. 32 (1980) 38–39. <https://doi.org/10.1007/bf03354553>.
- [44] E. Leunis, D. Hanlon, A. Rijkenberg, C. Scott, J. Drillet, R. Hackl, Quantitative phase analysis of multi-phase steels - PHAST, European Commission, 2006. <https://op.europa.eu/de/publication-detail/-/publication/d5ab6373-b433-4f94-ba0a-95cb0d171783>.
- [45] D. Britz, A. Hegetschweiler, F. Mücklich, Opening the door to fundamental understanding of structure and color metallography - A correlative microscopy study on steel, *Microsc. Microanal.* 20 (2014) 834–835. <https://doi.org/10.1017/S1431927614005893>.
- [46] A.M. Elwazri, P. Wanjara, S. Yue, Measurement of pearlite interlamellar spacing in hypereutectoid steels, *Mater. Charact.* 54 (2005) 473–478. <https://doi.org/10.1016/J.MATCHAR.2005.02.002>.
- [47] D.B. Williams, C.B. Carter, *Transmission Electron Microscopes - A Textbook for Materials Science*, Springer Science+Business Media, New York, 2009.
- [48] A.J. Schwartz, M. Kumar, B.L. Adams, D.P. Field, *Electron backscatter diffraction in materials science*, Springer US, 2009. <https://doi.org/10.1007/978-0-387-88136-2>.
- [49] B. Zitová, J. Flusser, Image registration methods: A survey, *Image Vis. Comput.* 21 (2003) 977–1000. [https://doi.org/10.1016/S0262-8856\(03\)00137-9](https://doi.org/10.1016/S0262-8856(03)00137-9).
- [50] D. Britz, J. Webel, J. Gola, A Correlative Approach to Capture and Quantify Substructures by Means of Image Registration, *Pract. Metallogr.* 54 (2017) 685–696.
- [51] J. Caplan, M. Niethammer, R.M. Taylor, K.J. Czymmek, The power of correlative microscopy: Multi-modal, multi-scale, multi-dimensional, *Curr. Opin. Struct. Biol.* 21 (2011) 686–693. <https://doi.org/10.1016/j.sbi.2011.06.010>.
- [52] J. Goldstein, D.E. Newbury, P. Echlin, D.C. Joy, A.D. Romig Jr., C.E. Lyman, C. Fiori, E. Lifshin, *Scanning Electron Microscopy and X-Ray Microanalysis: A Text for Biologists, Materials Scientists, and Geologists*, 2nd ed., Springer, New York, USA, 2012.

- [53] E. Hecht, *Optics*, 4th ed., Addison-Wesley, Harlow, Essex, England, 2001.
- [54] A. Sotiras, C. Davatzikos, N. Paragios, Deformable Medical Image Registration: A Survey, *IEEE Trans. Med. Imaging*. 32 (2013) 1153–1190. <https://doi.org/10.1109/TMI.2013.2265603>.
- [55] S. Singh Bisht, B. Gupta, P. Rahi, Image Registration Concept and Techniques: A Review, *Int. J. Eng. Res. Appl.* 4 (2014) 30–35. www.ijera.com.
- [56] R. Singh Phogat, H. Dhamecha, M. Pandya, B. Chaudhary, M. Potdar, Different Image Registration Methods – An Overview, *Int. J. Sci. Eng. Res.* 5 (2014) 44–49. <http://www.ijser.org>.
- [57] Feature Extraction - ImageJ, https://imagej.net/Feature_Extraction (accessed April 14, 2021).
- [58] BUwarpJ - ImageJ, <https://imagej.net/BUwarpJ> (accessed April 14, 2021).
- [59] J. Schindelin, I. Arganda-Carreras, E. Frise, V. Kaynig, M. Longair, T. Pietzsch, S. Preibisch, C. Rueden, S. Saalfeld, B. Schmid, J.Y. Tinevez, D.J. White, V. Hartenstein, K. Eliceiri, P. Tomancak, A. Cardona, Fiji: An open-source platform for biological-image analysis, *Nat. Methods*. 9 (2012) 676–682. <https://doi.org/10.1038/nmeth.2019>.
- [60] D.G. Lowe, Distinctive image features from scale-invariant keypoints, *Int. J. Comput. Vis.* 60 (2004) 91–110. <https://doi.org/10.1023/B:VISI.0000029664.99615.94>.
- [61] I. Arganda-Carreras, C.O.S. Sorzano, R. Marabini, J.M. Carazo, C. Ortiz-De-Solorzano, J. Kybic, Consistent and elastic registration of histological sections using vector-spline regularization, *Lect. Notes Comput. Sci.* 4241 LNCS (2006) 85–95. https://doi.org/10.1007/11889762_8.
- [62] C.Ó.S. Sorzano, P. Thévenaz, M. Unser, Elastic registration of biological images using vector-spline regularization, *IEEE Trans. Biomed. Eng.* 52 (2005) 652–663. <https://doi.org/10.1109/TBME.2005.844030>.
- [63] D. Britz, J. Webel, A.S. Schneider, F. Mücklich, Identifying and quantifying microstructures in low-alloyed steels: A correlative approach, *Metall. Ital.* 109 (2017) 5–10.
- [64] P.T. Pinard, A. Schwedt, A. Ramazani, U. Prah, S. Richter, Characterization of dual-phase steel microstructure by combined submicrometer EBSD and EPMA carbon measurements, *Microsc. Microanal.* 19 (2013) 996–1006. <https://doi.org/10.1017/S1431927613001554>.
- [65] X. Li, A. Ramazani, U. Prah, W. Bleck, Quantification of complex-phase steel microstructure by using combined EBSD and EPMA measurements, *Mater. Charact.* 142 (2018) 179–186. <https://doi.org/10.1016/j.matchar.2018.05.038>.
- [66] R.A. Rijkenberg, M.P. Aarnts, F.A. Twisk, M.J. Zuijderwijk, M. Knieps, H. Pfaff, Linking Crystallographic, Chemical and Nano-Mechanical Properties of Phase Constituents in DP and TRIP Steels, *Mater. Sci. Forum.* 638–642 (2010) 3465–3472. <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/MSF.638-642.3465>.
- [67] M. Ackermann, B. Resiak, P. Buessler, B. Michaut, J.C. Hell, S. Richter, J. Gibson, W. Bleck, Methods to Classify Bainite in Wire Rod Steel, *Steel Res. Int.* 92 (2021). <https://doi.org/10.1002/srin.202000454>.
- [68] S. Dzaszyk, Gefügecharakterisierung von niedriglegierten Mehrphasenstählen mittels Orientierungsmikroskopie und Nanoindentierung, Ruhr-Universität Bochum, 2010.
- [69] S.-H. Na, J.-B. Seol, M. Jafari, C.-G. Park, A Correlative Approach for Identifying Complex Phases

- by Electron Backscatter Diffraction and Transmission Electron Microscopy, *Appl. Microsc.* 47 (2017) 43–49. <https://doi.org/10.9729/AM.2017.47.1.43>.
- [70] C. Hofer, V. Bliznuk, A. Verdieri, R. Petrov, F. Winkelhofer, H. Clemens, S. Primig, Correlative microscopy of a carbide-free bainitic steel, *Micron.* 81 (2016) 1–7. <https://doi.org/10.1016/j.micron.2015.10.008>.
- [71] B. Jähne, *Digitale Bildverarbeitung und Bildgewinnung*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2012. <https://doi.org/10.1007/978-3-642-04952-1>.
- [72] P.K. Sahoo, S. Soltani, A.K.C. Wong, A survey of thresholding techniques, *Comput. Vision, Graph. Image Process.* 41 (1988) 233–260. [https://doi.org/10.1016/0734-189X\(88\)90022-9](https://doi.org/10.1016/0734-189X(88)90022-9).
- [73] N. Otsu, A Threshold Selection Method from Gray-Level Histograms, *IEEE Trans. Syst. Man. Cybern.* 9 (1979) 62–66. <https://doi.org/10.1109/TSMC.1979.4310076>.
- [74] N. Senthilkumaran, R. Rajesh, Image Segmentation - A Survey of Soft Computing Approaches, in: 2009 Int. Conf. Adv. Recent Technol. Commun. Comput., IEEE, 2009: pp. 844–846. <https://doi.org/10.1109/ARTCom.2009.219>.
- [75] S.C. Siddhart, K. Ajay, P.S. Uday, Soft Computing Approaches for Image Segmentation, in: *Multimedia Tools and Applications*, 2018. <https://doi.org/10.4018/978-1-5225-3531-7.ch014>.
- [76] Wenshuo Gao, Xiaoguang Zhang, Lei Yang, Huizhong Liu, An improved Sobel edge detection, in: 2010 3rd Int. Conf. Comput. Sci. Inf. Technol., IEEE, 2010: pp. 67–71. <https://doi.org/10.1109/ICCSIT.2010.5563693>.
- [77] J. Canny, A Computational Approach to Edge Detection, *IEEE Trans. Pattern Anal. Mach. Intell.* PAMI-8 (1986) 679–698. <https://doi.org/10.1109/TPAMI.1986.4767851>.
- [78] J. Illingworth, J. Kittler, A survey of the hough transform, *Comput. Vision, Graph. Image Process.* 44 (1988) 87–116. [https://doi.org/10.1016/S0734-189X\(88\)80033-1](https://doi.org/10.1016/S0734-189X(88)80033-1).
- [79] A.K. Jain, A. K., *Fundamentals of digital image processing*, Prentice-Hall, Inc, 1989.
- [80] W.-M. Lippe, *Soft-Computing*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2006.
- [81] J. Ohser, F. Mücklich, *Statistical Analysis of Microstructures in Materials Science*, Wiley, 2000.
- [82] J.J. Friel, J.C. Grande, D. Hetzner, K. Kurzydłowski, D. Laferty, *Practical guide to image analysis*, ASM International, 2000.
- [83] R.M. Haralick, Statistical and structural approaches to texture, in: *Proc. IEEE*, 1979: pp. 786–804.
- [84] R. Haralick, K. Shanmugan, I. Dinstein, Textural features for image classification, *IEEE Trans. Syst. Man Cybern.* 3 (1973) 610–621. <https://doi.org/10.1109/TSMC.1973.4309314>.
- [85] J. Webel, J. Gola, D. Britz, F. Mücklich, A new analysis approach based on Haralick texture features for the characterization of microstructure on the example of low-alloy steels, *Mater. Charact.* 144 (2018) 584–596. <https://doi.org/10.1016/j.matchar.2018.08.009>.
- [86] A. Wibmer, H. Hricak, T. Gondo, K. Matsumoto, H. Veeraraghavan, D. Fehr, J. Zheng, D. Goldman, C. Moskowitz, S.W. Fine, V.E. Reuter, J. Eastham, E. Sala, H.A. Vargas, Haralick texture analysis of prostate MRI: utility for differentiating non-cancerous prostate from prostate cancer and differentiating prostate cancers with different Gleason scores, *Eur. Radiol.* 25 (2015) 2840–2850. <https://doi.org/10.1007/s00330-015-3701-8>.

- [87] Texture Analysis Using the Gray-Level Co-Occurrence Matrix (GLCM) - MATLAB & Simulink - MathWorks Deutschland, <https://de.mathworks.com/help/images/texture-analysis-using-the-gray-level-co-occurrence-matrix-g lcm.html> (accessed January 26, 2022).
- [88] S. Dutta, K. Barat, A. Das, S.K. Das, A.K. Shukla, H. Roy, Characterization of micrographs and fractographs of Cu-strengthened HSLA steel using image texture analysis, *Measurement*. 47 (2014) 130–144. <https://doi.org/10.1016/j.measurement.2013.08.030>.
- [89] T. Ojala, M. Pietikäinen, T. Mäenpää, Multiresolution gray-scale and rotation invariant texture classification with local binary patterns, *IEEE Trans. Pattern Anal. Mach. Intell.* 24 (2002) 971–987. <https://doi.org/10.1109/TPAMI.2002.1017623>.
- [90] S. Majid, *Advanced Microstructure Classification of Steel by Classic and Deep Learning Methods*, Universität des Saarlandes, 2016.
- [91] T. Mäenpää, M. Pietikäinen, Multi-scale binary patterns for texture analysis, *Lect. Notes Comput. Sci.* 2749 (2003) 885–892. https://doi.org/10.1007/3-540-45103-x_117.
- [92] J. Gola, J. Webel, D. Britz, A. Guitar, T. Staudt, M. Winter, F. Mücklich, Objective microstructure classification by support vector machine (SVM) using a combination of morphological parameters and textural features for low carbon steels, *Comput. Mater. Sci.* 160 (2019) 186–196. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2019.01.006>.
- [93] S. Gupta, J. Sarkar, M. Kundu, N.R. Bandyopadhyay, S. Ganguly, Automatic recognition of SEM microstructure and phases of steel using LBP and random decision forest operator, *Measurement*. 151 (2020). <https://doi.org/10.1016/j.measurement.2019.107224>.
- [94] K. Tsutsui, H. Terasaki, K. Uto, T. Maemura, S. Hiramatsu, K. Hayashi, K. Moriguchi, S. Morito, A methodology of steel microstructure recognition using SEM images by machine learning based on textural analysis, *Mater. Today Commun.* 25 (2020) 1–13. <https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2020.101514>.
- [95] X. Liu, *Microstructural Characterisation of Pearlitic and Complex Phase Steels Using Image Analysis Methods*, University of Birmingham, 2014.
- [96] D.M. Dimiduk, E.A. Holm, S.R. Niezgoda, Perspectives on the Impact of Machine Learning, Deep Learning, and Artificial Intelligence on Materials, Processes, and Structures Engineering, *Integr. Mater. Manuf. Innov.* 7 (2018) 157–172. <https://doi.org/10.1007/s40192-018-0117-8>.
- [97] ChatGPT: Optimizing Language Models for Dialogue, <https://openai.com/blog/chatgpt/> (accessed February 4, 2023).
- [98] DALL·E 2, <https://openai.com/dall-e-2/> (accessed February 4, 2023).
- [99] O. Ronneberger, P. Fischer, T. Brox, U-Net: Convolutional Networks for Biomedical Image Segmentation, *Lect. Notes Comput. Sci. (Including Subser. Lect. Notes Artif. Intell. Lect. Notes Bioinformatics)*. 9351 (2015) 234–241. https://doi.org/10.1007/978-3-319-24574-4_28.
- [100] F.S. Saleh, M.S. Aliakbarian, M. Salzmänn, L. Petersson, J.M. Alvarez, Effective Use of Synthetic Data for Urban Scene Semantic Segmentation, *Lect. Notes Comput. Sci. (Including Subser. Lect. Notes Artif. Intell. Lect. Notes Bioinformatics)*. 11206 LNCS (2018) 86–103. https://doi.org/10.1007/978-3-030-01216-8_6.

- [101] P. Natekar, A. Kori, G. Krishnamurthi, Demystifying Brain Tumor Segmentation Networks: Interpretability and Uncertainty Analysis, *Front. Comput. Neurosci.* 14 (2020) 6. <https://doi.org/10.3389/FNCOM.2020.00006/BIBTEX>.
- [102] When to Use Machine Learning - Amazon Machine Learning, <https://docs.aws.amazon.com/machine-learning/latest/dg/when-to-use-machine-learning.html> (accessed February 4, 2023).
- [103] Home - KI-Konkret, <https://www.ki-konkret.de/> (accessed February 4, 2023).
- [104] S. Russel, Peter Norvig, *Artificial intelligence: A Modern Approach*, 3rd ed., Pearson Education, Inc., Upper Saddle River, 2010.
- [105] S. Richter, *Statistisches und maschinelles Lernen*, Springer Berlin Heidelberg, 2019. <https://doi.org/10.1007/978-3-662-59354-7>.
- [106] M. Halkidi, Y. Batistakis, M. Vazirgiannis, On clustering validation techniques, *J. Intell. Inf. Syst.* 17 (2001) 107–145. <https://doi.org/10.1023/A:1012801612483>.
- [107] A. Géron, *Hands-on Machine Learning with Scikit-Learn, Keras & TensorFlow*, O'Reilly Media, Inc., 2019.
- [108] J. Han, M. Kamber, J. Pei, *Data mining - Concepts and Techniques*, 3rd ed., Elsevier, 2012.
- [109] http://static.apub.kr/journalsite/sites/kaomi/2020-024-03/N0880240305/images/kaomi_24_03_05_F7.jpg, http://static.apub.kr/journalsite/sites/kaomi/2020-024-03/N0880240305/images/kaomi_24_03_05_F7.jpg (accessed January 26, 2022).
- [110] M. Paluszczek, S. Thomas, *MATLAB machine learning recipes: A problem-solution approach*, 2nd ed., 2019. <https://doi.org/10.1007/978-1-4842-3916-2>.
- [111] The Most Amazing Artificial Intelligence Milestones So Far, <https://www.forbes.com/sites/bernardmarr/2018/12/31/the-most-amazing-artificial-intelligence-milestones-so-far/?sh=4cd884337753> (accessed February 4, 2023).
- [112] D. Forsyth, *Applied Machine Learning*, 2019. <https://doi.org/10.1007/978-3-030-18114-7>.
- [113] S. Ta Liu, *Machine Learning: A Practical Approach on the Statistical Learning Theory*, 2020. <https://doi.org/10.1080/00401706.2020.1825645>.
- [114] Machine Learning Q&A: All About Model Validation - MATLAB & Simulink, <https://de.mathworks.com/campaigns/offers/next/all-about-model-validation.html> (accessed February 4, 2023).
- [115] A. Zheng, *Evaluating Machine Learning Algorithms*, 1st ed., O'Reilly, 2015.
- [116] M. Sokolova, G. Lapalme, A systematic analysis of performance measures for classification tasks, *Inf. Process. Manag.* 45 (2009) 427–437. <https://doi.org/10.1016/j.ipm.2009.03.002>.
- [117] Difference in Data Mining Vs Machine Learning Vs Artificial Intelligence, <https://www.softwaretestinghelp.com/data-mining-vs-machine-learning-vs-ai/> (accessed February 4, 2023).
- [118] Machine Learning in MATLAB - MATLAB & Simulink - MathWorks Deutschland, <https://de.mathworks.com/help/stats/machine-learning-in-matlab.html> (accessed February 4,

- 2023).
- [119] Support Vector Machine (SVM) - MATLAB & Simulink, <https://de.mathworks.com/discovery/support-vector-machine.html> (accessed February 4, 2023).
- [120] C.-W. Hsu, C.-C. Chang, C.-J. Lin, A Practical Guide to Support Vector Classification, 2003. <http://www.csie.ntu.edu.tw/~cjlin>.
- [121] The Kernel Trick in Support Vector Classification | by Drew Wilimitis | Towards Data Science, <https://towardsdatascience.com/the-kernel-trick-c98cdbcaeb3f> (accessed February 4, 2023).
- [122] Decision tree learning - Wikipedia, https://en.wikipedia.org/wiki/Decision_tree_learning (accessed February 4, 2023).
- [123] Decision Trees - scikit-learn documentation, <https://scikit-learn.org/stable/modules/tree.html> (accessed February 4, 2023).
- [124] Introduction to Feature Selection - MATLAB & Simulink - MathWorks Deutschland, <https://de.mathworks.com/help/stats/feature-selection.html> (accessed February 4, 2023).
- [125] I. Guyon, A. Elisseeff, An Introduction to Variable and Feature Selection Isabelle, J. Mach. Learn. Res. 3 (2003) 1157–1182.
- [126] C.C. Aggarwal, Neural Networks and Deep Learning, Springer International Publishing AG, 2018. <https://doi.org/10.1007/978-3-319-94463-0>.
- [127] What are Convolutional Neural Networks? | IBM, <https://www.ibm.com/topics/convolutional-neural-networks> (accessed February 6, 2023).
- [128] S. Tammina, Transfer learning using VGG-16 with Deep Convolutional Neural Network for Classifying Images, Int. J. Sci. Res. Publ. 9 (2019) p9420. <https://doi.org/10.29322/ijsrp.9.10.2019.p9420>.
- [129] VGGNet mit TensorFlow (Transferlernen mit VGG16 inklusive), <https://ichi.pro/de/vggnet-mit-tensorflow-transferlernen-mit-vgg16-inklusive-138948360357786> (accessed February 6, 2023).
- [130] Learn How to Train U-Net On Your Dataset | by Sukriti Paul | Coinmonks | Medium, <https://medium.com/coinmonks/learn-how-to-train-u-net-on-your-dataset-8e3f89fbd623> (accessed February 6, 2023).
- [131] ImageNet, <https://www.image-net.org/> (accessed February 6, 2023).
- [132] A.R. Kitahara, E.A. Holm, Microstructure Cluster Analysis with Transfer Learning and Unsupervised Learning, Integr. Mater. Manuf. Innov. 7 (2018) 148–156. <https://doi.org/10.1007/s40192-018-0116-9>.
- [133] J. Platt, Probabilistic outputs for support vector machines and comparisons to regularized likelihood methods, Adv. Large Margin Classif. 10 (1999) 61–74.
- [134] S. Theodoridis, K. Koutroumbas, Pattern Recognition, Elsevier Inc., 2009. <https://doi.org/10.1016/B978-1-59749-272-0.X0001-2>.
- [135] J. Xie, R. Girshick, A. Farhadi, Unsupervised deep embedding for clustering analysis, 33rd Int. Conf. Mach. Learn. ICML 2016. 1 (2016) 740–749.
- [136] A. Kanezaki, Unsupervised image segmentation by backpropagation, ICASSP, IEEE Int. Conf. Acoust. Speech Signal Process. - Proc. 2018-April (2018) 1543–1547.

- <https://doi.org/10.1109/ICASSP.2018.8462533>.
- [137] A. Agrawal, A. Choudhary, Perspective: Materials informatics and big data: Realization of the “fourth paradigm” of science in materials science, *APL Mater.* 4 (2016). <https://doi.org/10.1063/1.4946894>.
- [138] The Minerals Metals & Materials Society (TMS), Employing artificial intelligence to accelerate development and implementation of materials and manufacturing innovations, 2022. <https://doi.org/dx.doi.org/10.7449/aistudy>.
- [139] Materials Genome Initiative | WWW.MGI.GOV, <https://www.mgi.gov/> (accessed February 6, 2023).
- [140] J. Wei, X. Chu, X.Y. Sun, K. Xu, H.X. Deng, J. Chen, Z. Wei, M. Lei, Machine learning in materials science, *InfoMat.* 1 (2019) 338–358. <https://doi.org/10.1002/inf2.12028>.
- [141] N. Fujinuma, B.L. DeCost, J. Hattrick-Simpers, S.E. Lofland, Reflections on the future of machine learning for materials research, (2021) 2–4. <http://arxiv.org/abs/2112.09764>.
- [142] Y. Liu, C. Niu, Z. Wang, Y. Gan, Y. Zhu, S. Sun, T. Shen, Machine learning in materials genome initiative: A review, *J. Mater. Sci. Technol.* 57 (2020) 113–122. <https://doi.org/10.1016/j.jmst.2020.01.067>.
- [143] Y. Liu, T. Zhao, W. Ju, S. Shi, Materials discovery and design using machine learning, *J. Mater.* 3 (2017) 159–177. <https://doi.org/10.1016/j.jmat.2017.08.002>.
- [144] R. Ramprasad, R. Batra, G. Pilania, A. Mannodi-Kanakkithodi, C. Kim, Machine learning in materials informatics: Recent applications and prospects, *Npj Comput. Mater.* 3 (2017). <https://doi.org/10.1038/s41524-017-0056-5>.
- [145] I.D. Jung, D.S. Shin, D. Kim, J. Lee, M.S. Lee, H.J. Son, N.S. Reddy, M. Kim, S.K. Moon, K.T. Kim, J.H. Yu, S. Kim, S.J. Park, H. Sung, Artificial intelligence for the prediction of tensile properties by using microstructural parameters in high strength steels, *Materialia.* 11 (2020). <https://doi.org/10.1016/j.mtla.2020.100699>.
- [146] C. Herriott, A.D. Spear, Predicting microstructure-dependent mechanical properties in additively manufactured metals with machine- and deep-learning methods, *Comput. Mater. Sci.* 175 (2020) 109599. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2020.109599>.
- [147] C. Shen, C. Wang, P.E.J. Rivera-Díaz-del-Castillo, D. Xu, Q. Zhang, C. Zhang, W. Xu, Discovery of maraging steels: machine learning vs. physical metallurgical modelling, *J. Mater. Sci. Technol.* 87 (2021) 258–268. <https://doi.org/10.1016/j.jmst.2021.02.017>.
- [148] R. Dong, Y. Dan, X. Li, J. Hu, Inverse design of composite metal oxide optical materials based on deep transfer learning and global optimization, *Comput. Mater. Sci.* (2020) 110166. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2020.110166>.
- [149] V.H.C. De Albuquerque, P.C. Cortez, A.R. De Alexandria, J.M.R.S. Tavares, A new solution for automatic microstructures analysis from images based on a backpropagation artificial neural network, *Nondestruct. Test. Eval.* 23 (2008) 273–283. <https://doi.org/10.1080/10589750802258986>.
- [150] V.H.C. De Albuquerque, C.C. Silva, T.I. de S. Menezes, J.P. Farias, J.M.R.S. Tavares, Automatic

- evaluation of nickel alloy secondary phases from SEM images, *Microsc. Res. Tech.* 74 (2011) 36–46. <https://doi.org/10.1002/jemt.20870>.
- [151] B.L. DeCost, B. Lei, T. Francis, E.A. Holm, High throughput quantitative metallography for complex microstructures using deep learning: A case study in ultrahigh carbon steel, *Microsc. Microanal.* 25 (2019) 21–29. <https://doi.org/10.1017/S1431927618015635>.
- [152] C. Shen, C. Wang, M. Huang, N. Xu, S. van der Zwaag, W. Xu, A generic high-throughput microstructure classification and quantification method for regular SEM images of complex steel microstructures combining EBSD labeling and deep learning, *J. Mater. Sci. Technol.* 93 (2021) 191–204. <https://doi.org/10.1016/j.jmst.2021.04.009>.
- [153] A. Thomas, A.R. Durmaz, T. Straub, C. Eberl, Automated quantitative analyses of fatigue-induced surface damage by deep learning, *Materials (Basel)*. 13 (2020) 1–24. <https://doi.org/10.3390/ma13153298>.
- [154] D.S. Bulgarevich, S. Tsukamoto, T. Kasuya, M. Demura, M. Watanabe, Pattern recognition with machine learning on optical microscopy images of typical metallurgical microstructures, *Sci. Rep.* 8 (2018) 3–9. <https://doi.org/10.1038/s41598-018-20438-6>.
- [155] J. Komenda, Automatic recognition of complex microstructures using the Image Classifier, *Mater. Charact.* 46 (2001) 87–92. [https://doi.org/10.1016/S1044-5803\(01\)00106-1](https://doi.org/10.1016/S1044-5803(01)00106-1).
- [156] M. Müller, D. Britz, F. Mücklich, Application of Trainable Segmentation to Microstructural Images Using Low-alloy Steels as an Example, *Pract. Metallogr.* 57 (2020) 337–358. <https://doi.org/10.3139/147.110640>.
- [157] E.A. Holm, R. Cohn, N. Gao, A.R. Kitahara, T.P. Matson, B. Lei, S.R. Yarasi, Overview: Computer Vision and Machine Learning for Microstructural Characterization and Analysis, *Metall. Mater. Trans. A Phys. Metall. Mater. Sci.* 51 (2020) 5985–5999. <https://doi.org/10.1007/s11661-020-06008-4>.
- [158] M. Ge, F. Su, Z. Zhao, D. Su, Deep Learning Analysis on Microscopic Imaging in Materials Science, *Mater. Today Nano.* (2020). <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.mtnano.2020.100087>.
- [159] A. Velichko, Quantitative 3D Characterization of Graphite Morphologies in Cast Iron using FIB Microstructure Tomography, Universität des Saarlandes, 2008.
- [160] K. Gajalakshmi, S. Palanivel, N.J. Nalini, S. Saravanan, Automatic classification of cast iron grades using support vector machine, *Optik (Stuttg.)*. 157 (2018) 724–732. <https://doi.org/10.1016/j.ijleo.2017.11.183>.
- [161] B.L. DeCost, E.A. Holm, A computer vision approach for automated analysis and classification of microstructural image data, *Comput. Mater. Sci.* 110 (2015) 126–133. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2015.08.011>.
- [162] B.L. DeCost, E.A. Holm, Characterizing powder materials using keypoint-based computer vision methods, *Comput. Mater. Sci.* 126 (2017) 438–445. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2016.08.038>.
- [163] A. Chowdhury, E. Kautz, B. Yener, D. Lewis, Image driven machine learning methods for

- microstructure recognition, *Comput. Mater. Sci.* 123 (2016) 176–187. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2016.05.034>.
- [164] J. Ling, M. Hutchinson, E. Antono, B.L. DeCost, E.A. Holm, B. Meredig, Building data-driven models with microstructural images: Generalization and interpretability, *Mater. Discov.* 10 (2017) 19–28. <https://doi.org/10.1016/j.md.2018.03.002>.
- [165] B.L. DeCost, T. Francis, E.A. Holm, Exploring the microstructure manifold: Image texture representations applied to ultrahigh carbon steel microstructures, *Acta Mater.* 133 (2017) 30–40. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2017.05.014>.
- [166] S. Arivazhagan, J.J. Tracia, N. Selvakumar, Classification of steel microstructures using Modified Alternate Local Ternary Pattern, *Mater. Res. Express.* 6 (2019) 1–9. <https://doi.org/10.1088/2053-1591/ab2d83>.
- [167] D.L. Naik, H.U. Sajid, R. Kiran, Texture-based metallurgical phase identification in structural steels: A supervised machine learning approach, *Metals (Basel)*. 9 (2019). <https://doi.org/10.3390/met9050546>.
- [168] S.M. Azimi, D. Britz, M. Engstler, M. Fritz, F. Mücklich, Advanced steel microstructural classification by deep learning methods, *Sci. Rep.* 8 (2018) 1–14. <https://doi.org/10.1038/s41598-018-20037-5>.
- [169] J. Gola, D. Britz, T. Staudt, M. Winter, A.S. Schneider, M. Ludovici, F. Mücklich, Advanced microstructure classification by data mining methods, *Comput. Mater. Sci.* 148 (2018) 324–335. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2018.03.004>.
- [170] M.D. Fischer, Quantitative Analyse feinkörniger, komplexer und mehrphasiger Mikrostrukturen, Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen, 2015. <http://publications.rwth-aachen.de/record/660691>.
- [171] E. Miyama, C. Voit, M. Pohl, Zementitnachweis zur Unterscheidung von Bainitstufen in modernen, niedriglegierten Mehrphasenstählen, *Prakt. Metallogr.* 48 (2011) 261–272.
- [172] S. Banerjee, S. Datta, B. Paul, S.K. Saha, Segmentation of three phase micrograph: an automated approach, *Proc. CUBE Int. Inf. Technol. Conf. ACM* (2012) 1–4. <https://doi.org/10.1145/2381716.2381718>.
- [173] A. Paul, A. Gangopadhyay, A.R. Chintla, D.P. Mukherjee, P. Das, S. Kundu, Calculation of phase fraction in steel microstructure images using random forest classifier, *IET Image Process.* 12 (2018) 1370–1377. <https://doi.org/10.1049/iet-ipr.2017.1154>.
- [174] A.J. DeArdo, C.I. Garcia, K. Cho, M. Hua, New method of characterizing and quantifying complex microstructures in steels, *Mater. Manuf. Process.* 25 (2010) 33–40. <https://doi.org/10.1080/10426910903143415>.
- [175] Y.W. Chen, Y.T. Tsai, P.Y. Tung, S.P. Tsai, C.Y. Chen, S.H. Wang, J.R. Yang, Phase quantification in low carbon Nb-Mo bearing steel by electron backscatter diffraction technique coupled with kernel average misorientation, *Mater. Charact.* 139 (2018) 49–58. <https://doi.org/10.1016/j.matchar.2018.01.041>.
- [176] S. Zaefferer, P. Romano, F. Friedel, EBSD as a tool to identify and quantify bainite and ferrite in

- low-alloyed Al-TRIP steels, *J. Microsc.* 230 (2008) 499–508. <https://doi.org/10.1111/j.1365-2818.2008.02010.x>.
- [177] K. Zhu, D. Barbier, T. Iung, Characterization and quantification methods of complex BCC matrix microstructures in advanced high strength steels, *J. Mater. Sci.* 48 (2013) 413–423. <https://doi.org/10.1007/s10853-012-6756-9>.
- [178] S.L. Shrestha, A.J. Breen, P. Trimby, G. Proust, S.P. Ringer, J.M. Cairney, An automated method of quantifying ferrite microstructures using electron backscatter diffraction (EBSD) data, *Ultramicroscopy*. 137 (2014) 40–47. <https://doi.org/10.1016/j.ultramic.2013.11.003>.
- [179] H. Zhao, B.P. Wynne, E.J. Palmiere, A phase quantification method based on EBSD data for a continuously cooled microalloyed steel, *Mater. Charact.* 123 (2017) 339–348. <https://doi.org/10.1016/j.matchar.2016.11.024>.
- [180] K. Radwański, Structural characterization of low-carbon multiphase steels merging advanced research methods with light optical microscopy, *Arch. Civ. Mech. Eng.* 16 (2016) 282–293. <https://doi.org/10.1016/j.acme.2015.12.001>.
- [181] Oxford Instruments - Rapid Classification of Advanced High Strength Steels using EBSD, 2020. <https://nano.oxinst.com/campaigns/downloads/rapid-classification-of-advanced-high-strength-steels-using-ebsd>.
- [182] I. Arganda-Carreras, V. Kaynig, C. Rueden, K.W. Eliceiri, J. Schindelin, A. Cardona, H.S. Seung, Trainable Weka Segmentation: A machine learning tool for microscopy pixel classification, n.d. <https://doi.org/10.1093/bioinformatics/btx180>.
- [183] D.S. Bulgarevich, S. Tsukamoto, T. Kasuya, M. Demura, M. Watanabe, Automatic steel labeling on certain microstructural constituents with image processing and machine learning tools, *Sci. Technol. Adv. Mater.* 20 (2019) 532–542. <https://doi.org/10.1080/14686996.2019.1610668>.
- [184] B. Mulewicz, G. Korpala, J. Kusiak, U. Prahl, Autonomous interpretation of the microstructure of steels and special alloys, *Mater. Sci. Forum.* 949 MSF (2019) 24–31. <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/MSF.949.24>.
- [185] D. Iren, M. Ackermann, J. Gorfer, G. Pujar, S. Wesselmecking, U. Krupp, S. Bromuri, Aachen-Heerlen annotated steel microstructure dataset, *Sci. Data.* 8 (2021) 1–9. <https://doi.org/10.1038/s41597-021-00926-7>.
- [186] J. Frieß, Entwicklung einer reproduzierbaren Gefügeanalyse von Graphitmorphologien in Gusseisen mit Kugelgraphit, Ergebnisse, Universitätsbibliothek der RWTH Aachen, Aachen, 2021. <https://doi.org/10.18154/RWTH-2021-05961>.
- [187] L. Schmies, U. Sonntag, Quantitative Fraktographie unter Verwendung klassischer Verfahren, Topographie-Daten und Deep-Learning, (2021). <https://opus4.kobv.de/opus4-bam/frontdoor/index/index/docId/53491>.
- [188] A. Velichko, C. Holzapfel, F. Mücklich, 3D characterization of graphite morphologies in cast iron, *Adv. Eng. Mater.* 9 (2007) 39–45. <https://doi.org/10.1002/adem.200600175>.
- [189] T. Dahmen, P. Trampert, F. Boughorbel, J. Sprenger, M. Klusch, K. Fischer, C. Kübel, P. Slusallek, Digital reality: a model-based approach to supervised learning from synthetic data, *AI Perspect.* 1

- (2019) 1–12. <https://doi.org/10.1186/s42467-019-0002-0>.
- [190] P. Trampert, S. Schlabach, T. Dahmen, P. Slusallek, Exemplar-Based Inpainting Based on Dictionary Learning for Sparse Scanning Electron Microscopy, *Microsc. Microanal.* 24 (2018) 700–701. <https://doi.org/10.1017/s1431927618003999>.
- [191] Antonio Criminisi, Patrick Perez, Kentaro Toyama, Region filling and object removal by exemplar-based image inpainting, *IEEE Trans. Image Process.* 13, (2004) 1200–1212. www.csse.monash.edu.au/.
- [192] A.A. Efros, W.T. Freeman, Image quilting for texture synthesis and transfer, *Proc. 28th Annu. Conf. Comput. Graph. Interact. Tech. SIGGRAPH 2001.* (2001) 341–346. <https://doi.org/10.1145/383259.383296>.
- [193] X. Liu, V. Shapiro, Random heterogeneous materials via texture synthesis, *Comput. Mater. Sci.* 99 (2015) 177–189. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2014.12.017>.
- [194] N. Lubbers, T. Lookman, K. Barros, Inferring low-dimensional microstructure representations using convolutional neural networks, *Phys. Rev. E.* 96 (2017) 1–14. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.96.052111>.
- [195] I. Goodfellow, J. Pouget-Abadie, M. Mirza, B. Xu, D. Warde-Farley, S. Ozair, A. Courville, Y. Bengio, Generative adversarial networks, *Commun. ACM.* 63 (2020) 139–144. <https://doi.org/10.1145/3422622>.
- [196] T. Hsu, W.K. Epting, H. Kim, H.W. Abernathy, G.A. Hackett, A.D. Rollett, P.A. Salvador, E.A. Holm, Microstructure Generation via Generative Adversarial Network for Heterogeneous, Topologically Complex 3D Materials, *Jom.* 73 (2021) 90–102. <https://doi.org/10.1007/s11837-020-04484-y>.
- [197] B. Drost, Künstlich generierte hochaufgelöste mikroskopische Schliffbilder mittels Machine Learning, in: DGM Arbeitskreistreffen Quant. Gefügeanalyse, 2021.
- [198] A. Mangal, E.A. Holm, A dataset of synthetic hexagonal close packed 3D polycrystalline microstructures, grain-wise microstructural descriptors and grain averaged stress fields under uniaxial tensile deformation for two sets of constitutive parameters, *Data Br.* 21 (2018) 1833–1841. <https://doi.org/10.1016/j.dib.2018.10.172>.
- [199] W. Liu, J. Lian, N. Aravas, S. Münstermann, A strategy for synthetic microstructure generation and crystal plasticity parameter calibration of fine-grain-structured dual-phase steel, *Int. J. Plast.* 126 (2020). <https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2019.10.002>.
- [200] M. Müller, D. Britz, F. Mücklich, Machine Learning for Microstructure Classification - How to Assign the Ground Truth in the Most Objective Way?, *ASM Adv. Mater. Process.* 179 (2021) 16–21. <https://static.asminternational.org/amp/202101/16/>.
- [201] M. Müller, D. Britz, F. Mücklich, Scale-bridging Microstructural Analysis – A Correlative Approach to Microstructure Quantification Combining Microscopic Images and EBSD Data, *Pract. Metallogr.* 58 (2021) 408–426. <https://doi.org/10.1515/PM-2021-0032>.
- [202] S. Tsopanidis, S. Osovski, Unsupervised machine learning in fractography: Evaluation and interpretation, *Mater. Charact.* 182 (2021) 111551.

- <https://doi.org/10.1016/J.MATCHAR.2021.111551>.
- [203] H. Kim, J. Inoue, T. Kasuya, Unsupervised microstructure segmentation by mimicking metallurgists' approach to pattern recognition, *Sci. Rep.* 10 (2020) 1–11. <https://doi.org/10.1038/s41598-020-74935-8>.
- [204] C. Kunselman, S. Sheikh, M. Mikkelsen, V. Attari, R. Arróyave, Microstructure classification in the unsupervised context, *Acta Mater.* 223 (2022) 117434. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2021.117434>.
- [205] J. Gola, Objektive und reproduzierbare Gefügeklassifizierung niedriglegierter Stähle, Saarländische Universitäts- und Landesbibliothek, 2019. <https://doi.org/10.22028/D291-30205>.
- [206] M. Müller, D. Britz, L. Ulrich, T. Staudt, F. Mücklich, Classification of Bainitic Structures Using Textural Parameters and Machine Learning Techniques, *Metals (Basel)*. 630 (2020) 1–19. <https://doi.org/10.3390/met10050630>.
- [207] A.R. Durmaz, M. Müller, B. Lei, A. Thomas, D. Britz, E.A. Holm, C. Eberl, F. Mücklich, P. Gumbsch, A deep learning approach for complex microstructure inference, *Nat. Commun.* 12 (2021) 1–15. <https://doi.org/10.1038/s41467-021-26565-5>.
- [208] M. Müller, D. Britz, T. Staudt, F. Mücklich, Microstructural Classification of Bainitic Subclasses in Low-Carbon Multi-Phase Steels Using Machine Learning Techniques, *Metals (Basel)*. 1836 (2021). <https://doi.org/https://doi.org/10.3390/met11111836>.
- [209] N. Fonstein, *Advanced High Strength Sheet Steels*, Springer International Publishing Switzerland, 2015. <https://doi.org/10.1007/978-3-319-19165-2>.
- [210] L. Koll, P. Tsipouridis, E.A. Werner, Preparation of metallic samples for electron backscatter diffraction and its influence on measured misorientation, *J. Microsc.* 243 (2011) 206–219. <https://doi.org/10.1111/j.1365-2818.2011.03495.x>.
- [211] D. Sculley, G. Holt, D. Golovin, E. Davydov, T. Phillips, D. Ebner, V. Chaudhary, M. Young, J.F. Crespo, D. Dennison, Hidden technical debt in machine learning systems, *Adv. Neural Inf. Process. Syst.* 2015-Janua (2015) 2503–2511.
- [212] Cats and Dogs Breeds Classification Oxford Dataset | Kaggle, <https://www.kaggle.com/datasets/zippyz/cats-and-dogs-breeds-classification-oxford-dataset> (accessed February 7, 2023).
- [213] Dogs vs. Cats | Kaggle, <https://www.kaggle.com/c/dogs-vs-cats/data> (accessed February 7, 2023).
- [214] E.A. Holm, Microstructural characterization and analysis using computer vision and machine learning, in: *IMAT Conf.*, 2020.
- [215] E.A. Holm, In defense of the black box, *Science (80-.)*. 364 (2019) 26–27. <https://doi.org/10.1126/science.aax0162>.
- [216] Homepage | MTEX, (n.d.). <https://mtex-toolbox.github.io/> (accessed February 8, 2023).
- [217] A.J. Schwartz, M. Kumar, B.L. Adams, D.P. Field, *Electron backscatter diffraction in materials science*, Springer New York, 2009. <https://doi.org/https://doi.org/10.1007/978-0-387-88136-2>.
- [218] B. Krawczyk, Learning from imbalanced data: open challenges and future directions, *Prog. Artif. Intell.* 5 (2016) 221–232. <https://doi.org/10.1007/s13748-016-0094-0>.

- [219] H. He, E.A. Garcia, Learning from imbalanced data, *IEEE Trans. Knowl. Data Eng.* 21 (2009) 1263–1284. <https://doi.org/10.1109/TKDE.2008.239>.
- [220] N. V. Chawla, K.W. Bowyer, L.O. Hall, W.P. Kegelmeyer, SMOTE: Synthetic Minority Over-sampling Technique, *J. Artif. Intell. Res.* 16 (2002) 321–357. <https://doi.org/10.1613/jair.953>.
- [221] N. Japkowicz, S. Stephen, The class imbalance problem: A systematic study, *Intell. Data Anal.* 6 (2002) 429–449. <https://doi.org/10.3233/IDA-2002-6504>.
- [222] Train Classification Models in Classification Learner App - MATLAB & Simulink - MathWorks Deutschland, <https://de.mathworks.com/help/stats/train-classification-models-in-classification-learner-app.html> (accessed February 4, 2023).
- [223] M. Ludovici, Untersuchung von Data Mining Methoden zur automatisierten Klassifizierung von zweiphasigen Stahlgefügen, Universität des Saarlandes, 2017.
- [224] C. Ding, H. Peng, Minimum redundancy feature selection from microarray gene expression data, *J. Bioinform. Comput. Biol.* 3 (2005) 185–205. <https://doi.org/10.1142/S0219720005001004>.
- [225] Bayesian Optimization Workflow - MATLAB & Simulink - MathWorks Deutschland, <https://de.mathworks.com/help/stats/bayesian-optimization-workflow.html> (accessed February 6, 2023).
- [226] P. Branco, L. Torgo, R. Ribeiro, A Survey of Predictive Modelling under Imbalanced Distributions, (2015) 1–48. <http://arxiv.org/abs/1505.01658>.
- [227] Y. Sun, A.K.C. Wong, M.S. Kamel, Classification of imbalanced data: A review, *Int. J. Pattern Recognit. Artif. Intell.* 23 (2009) 687–719. <https://doi.org/10.1142/S0218001409007326>.
- [228] M. Pietikäinen, G. Zhao, Two decades of local binary patterns: A survey, in: *Adv. Indep. Compon. Anal. Learn. Mach.*, Elsevier, 2015: pp. 175–210. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-802806-3.00009-9>.
- [229] O. Lahdenoja, J. Poikonen, M. Laiho, Towards Understanding the Formation of Uniform Local Binary Patterns, *ISRN Mach. Vis.* 2013 (2013) 1–20. <https://doi.org/10.1155/2013/429347>.
- [230] O. Russakovsky, J. Deng, H. Su, J. Krause, S. Satheesh, S. Ma, Z. Huang, A. Karpathy, A. Khosla, M. Bernstein, A.C. Berg, L. Fei-Fei, ImageNet Large Scale Visual Recognition Challenge, *Int. J. Comput. Vis.* 115 (2014) 211–252. <https://doi.org/10.48550/arxiv.1409.0575>.
- [231] Classify Patterns with a Shallow Neural Network - MATLAB & Simulink - MathWorks Deutschland, <https://de.mathworks.com/help/deeplearning/gs/classify-patterns-with-a-neural-network.html> (accessed February 6, 2023).
- [232] 2-D superpixel oversegmentation of images - MATLAB superpixels - MathWorks Deutschland, <https://de.mathworks.com/help/images/ref/superpixels.html> (accessed November 11, 2021).
- [233] R. Achanta, A. Shaji, K. Smith, A. Lucchi, P. Fua, S. Süsstrunk, SLIC superpixels compared to state-of-the-art superpixel methods, *IEEE Trans. Pattern Anal. Mach. Intell.* 34 (2012) 2274–2281. <https://doi.org/10.1109/TPAMI.2012.120>.
- [234] M. Müller, G. Stanke, U. Sonntag, D. Britz, F. Mücklich, Segmentation of Lath-Like Structures via Localized Identification of Directionality in a Complex-Phase Steel, *Metallogr. Microstruct. Anal.* (2020) 1–12. <https://doi.org/10.1007/s13632-020-00676-9>.

- [235] D. Bau, B. Zhou, A. Khosla, A. Oliva, A. Torralba, Network Dissection: Quantifying Interpretability of Deep Visual Representations, *ArXiv*. (2017) 1–9. <https://doi.org/10.48550/arxiv.1704.05796>.
- [236] R.R. Selvaraju, M. Cogswell, A. Das, R. Vedantam, D. Parikh, D. Batra, Grad-CAM: Visual Explanations from Deep Networks via Gradient-based Localization, *Int. J. Comput. Vis.* 128 (2020) 336–359. <https://doi.org/10.1007/s11263-019-01228-7>.
- [237] A. Goetz, A.R. Durmaz, M. Müller, A. Thomas, D. Britz, P. Kerfriden, C. Eberl, Addressing materials’ microstructure diversity using transfer learning, *Npj Comput. Mater.* 8 (2022) 1–13. <https://doi.org/10.1038/s41524-022-00703-z>.
- [238] K. Tsutsui, H. Terasaki, T. Maemura, K. Hayashi, K. Moriguchi, S. Morito, Microstructural diagram for steel based on crystallography with machine learning, *Comput. Mater. Sci.* 159 (2019) 403–411. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2018.12.003>.
- [239] P. Rossi, M. Engstler, F. Mücklich, Homogeneity Quantification Method and its Application to Microstructure Assessment, *Pract. Metallogr.* 51 (2014) 180–199. <https://doi.org/10.3139/147.110287>.
- [240] B.-I. Bachmann, Prozess-Gefüge-Eigenschaftskorrelationen an ATP Blechen mit modernen Methoden der Gefügeanalyse unter Zuhilfenahme von maschinellem Lernen, Universität des Saarlandes, 2021.
- [241] G. Koch, R. Zemel, R. Salakhutdinov, Siamese Neural Networks for One-shot Image Recognition, in: *Proc. 32nd Int. Conf. Mach. Learn.*, 2015.
- [242] A. Kolesnikov, C.H. Lampert, Seed, expand and constrain: Three principles for weakly-supervised image segmentation, *Lect. Notes Comput. Sci. (Including Subser. Lect. Notes Artif. Intell. Lect. Notes Bioinformatics)*. 9908 LNCS (2016) 695–711. https://doi.org/10.1007/978-3-319-46493-0_42.
- [243] R. Stewart, S. Ermon, Label-free supervision of neural networks with physics and domain knowledge, *31st AAAI Conf. Artif. Intell. AAAI 2017*. 1 (2017) 2576–2582. <https://doi.org/10.1609/aaai.v31i1.10934>.
- [244] J. Brownlee, *Better Deep Learning : Train Faster, Reduce Overfitting, and Make Better Predictions, Mach. Learn. Mastery With Python.* (2019) 540.