



Title	マルチスケール計算におけるフェーズフィールド組織の再現性の定量的評価
Author(s)	伊勢谷, 健司
Degree Grantor	北海道大学
Degree Name	博士(工学)
Dissertation Number	甲第11615号
Issue Date	2014-12-25
DOI	https://doi.org/10.14943/doctoral.k11615
Doc URL	https://hdl.handle.net/2115/57720
Type	doctoral thesis
File Information	Kenji_Iseya.pdf



マルチスケール計算における
フェーズフィールド組織の再現性の定量的評価
A quantitative evaluation of a reproducibility of Phase Field
microstructure in the multiscale calculation

北海道大学 大学院工学院

材料科学専攻 マテリアル設計講座 強度システム設計研究室

伊勢谷 健司

目次

1. 緒言	1
1.1 フェーズフィールド法とマルチスケール計算	1
1.2 マルチスケール計算における粗視化の課題	1
1.3 内部組織の特徴とその評価方法	2
1.3.1 変分原理に基づく画像評価法	2
1.3.2 スペクトル解析	4
1.4 目的	5
2. フェーズフィールド法	10
2.1 計算理論	10
2.2 計算結果	11
2.2.1 計算手法	11
2.2.2 規則・不規則変態による規則ドメイン成長過程の計算	12
2.2.3 相分離過程の計算	13
2.3 結言	14
3. 変分原理に基づく組織の特徴の評価	20
3.1 組織の変化の評価方法	20
3.1.1 画像再現度のパラメーター R, R_2	21
3.1.2 平均化操作	22
3.1.3 平均化操作による組織の変化の評価方法	22
3.2 結果	23
3.2.1 移動平均による組織の変化の評価結果	23

3.2.2 ガウシアンフィルタによる組織の変化の評価結果	24
3.3 結言	25
4. スペクトル解析による組織の特徴の評価	37
4.1 スペクトル解析	37
4.1.1 スペクトル解析の数学的基礎	37
4.1.2 スペクトル解析による画像評価	39
4.2 結果	40
4.3 結言	41
5. 結論	47
参考文献	48
謝辞	51

1. 諸言

1.1 フェーズフィールド法とマルチスケール計算

フェーズフィールド法(Phase Field Method; PFM)¹⁻⁴⁾ は合金組織の時間発展過程のシミュレーションを行う強力な手法として広く知られている。PFM は組織の状態を記述する物理量の空間分布の時間発展過程を計算することで組織の時間発展過程を扱う現象論的モデルであり、デンドライト成長^{5,6)} やスピノーダル分解⁷⁻¹⁰⁾、規則/不規則変態¹¹⁻¹⁵⁾といった幅広い現象に適用することができる。近年、PFM は組織計算に留まらず有限要素法¹⁶⁾や均質化法¹⁷⁾などの他の数値計算手法と組み合わせることにより機械的/機能的性質までをも評価し得るものとなっている。

PFM に関する数ある研究の中でも一つの主流となっているのは、大規模計算によって空間・時間のスケールアップを図るというものである。とりわけ、近年の計算機性能の向上により扱える空間メッシュの数は飛躍的に増加した。これにより、大きなスケールの現象の原因となるミクロスケールの現象を明らかにすることができるようになった。あるいは逆に、ミクロスケールの現象の協力/競合現象として立ち現れるものとして大きなスケールの現象を予測することも可能となってきた。

1.2 マルチスケール計算における粗視化の課題

一般的に、異なる空間スケールをつなぐためには何らかの平均化操作が必須となる。統計力学においては、この過程は粗視化^{18, 19)}として知られる。比熱や密度、圧力といった系のマクロな物理量というのは、ミクロスケールの状態の空間的/時間的平均量として現れる。これは、ミクロスケールの詳細な情報は見ずに、より大きなスケール域で平均化された情報のみを見るということである。同様に、材料のマルチスケールの取り扱いにおいては、メソスケールの内部組織はミクロスケールの原子配列の詳細な情報を粗視化したものとして現れる。さらに、材料の機械的性質、機能的性質といったマクロスケールの特性というのは内部組織の情報が粗視化されたものとして得られると考えられる(図 1.1)。

粗視化の厳密な条件として、スケールの変化に対して分配関数が不変であることが求められるが、複雑な組織の形成過程に対してその条件を実際に適用するのは困難である。そのため、実際的な平均化操作が代替として用いられてきた。その最も単純なものは、ある領域内の平均値をとるというものであり、移動平均法やガウシアンフィルタといった平均

化操作は画像に含まれる細かなノイズを低減させて画像全体の大まかな特徴を見る目的で広く用いられている²⁰⁾。しかしこのような手法を組織画像に対して適用すると、あるスケールにおける詳細な情報が失われていき、そこで本質的な情報が失われてしまうとマルチスケール計算を行なっても満足な結果を得られないという問題がある。

1.3 内部組織の特徴とその評価方法

材料の内部組織の特徴は、図 1.2 に示す α/κ ラメラ組織²¹⁾ や図 1.3 に示す Ni 基超合金の γ/γ' 組織²²⁾ などに見られるように、実に様々である。そして、多結晶材料の強度と結晶粒径の関係を示した Hall-Petch 則²³⁾ や、析出物の大きさや間隔といった空間分布の状態によって変化する析出強化の機構²⁴⁾ のように、材料の機械的性質や機能的性質がその内部組織の特徴に強く依存することは広く知られている事実である。よって、計算によって得られた内部組織でも、実際の相の体積率や形態、空間分布といった特徴が再現されていることが重要である。これは、内部組織の時間発展を支配する系の自由エネルギーの記述を厳密化することで達成されてきた。Mohri²⁵⁾ らは FLAPW 法とクラスター変分法(Cluster Variation Method; CVM)²⁶⁻²⁹⁾、PFM を組み合わせた電子状態の全エネルギー計算に基づく Fe-Pd 系の内部組織の計算を行った。

一方で、組織計算は一種の画像生成プロセスであるともいえる。計算により得られた組織画像に明瞭なコントラストがなければ、どれだけ自由エネルギーを正確に記述しようとも有用な情報は得られない。PFM に基づくマルチスケール計算を行うには、粗視化の過程は不可避である。しかし、そのようにして生成された内部組織の特徴を定量的に評価することは容易ではなく、平均化前後で元の特徴がどの程度保持されているかを評価する方法は確立されていない。

上述の観点から、PFM により生成した組織画像の再現性について、変分原理に基づく画像評価法およびスペクトル解析を利用した解析手法の系統的な研究を行った。

1.3.1 変分原理に基づく画像評価法

Tanaka と Morita^{30,31)} は、変分原理に基づく統計力学的手法を利用して、ノイズが入り劣化した画像から元画像の復元を行った。Tanaka と Morita による研究とその理論については 3 章で概説するが、その核となるのはベイズ統計である。事象 A が起こる確率を $P(A)$ 、事象 A が起きたという条件の下で事象 B が起きる条件付き確率を $P(B|A)$ とする。事象

B が起きたという条件の下で事象 A が起きる条件付き確率 $P(A|B)$ は、以下のベイズの定理で与えられる。

$$P(A|B) = \frac{P(B|A)P(A)}{\sum_A P(B|A)P(A)} \quad (1.1)$$

ここで、 Σ_A は全ての起こりうる事象 A について総和をとることを意味している。ベイズの定理を画像修復の問題に応用する際の基本的な考え方を Tanaka と Morita の論文^{30,31)}に基づいて以下に記す。

図 1.4(a) の original image に対して、ランダムノイズが加えられ劣化した画像が 図 1.4 (b) の damaged image である。今、この damaged image を復元し、original image に近づけるという問題を考える。白黒の二値画像をイジングモデルとみなし、original image の配列を $s_I = \{s_1, s_2, \dots, s_L\}$ で表す。ここで、 L は格子点の総数、 s_i は格子点 i の色が黒のとき 1、白のとき -1 となる関数である。同様に、damaged image の配列を $h_I = \{h_1, h_2, \dots, h_L\}$ とすると、ベイズ統計⁴⁶⁾における復元画像の条件付き確率は以下ようになる。

$$P(s_I|h_I) = \frac{P(h_I|s_I)P(s_I)}{\sum_{s_I} P(h_I|s_I)P(s_I)} \quad (1.2)$$

ここで、 $\sum_{s_I} = \sum_{s_1=\pm 1} \sum_{s_2=\pm 1} \dots \sum_{s_L=\pm 1}$ である。

original image s_I から damaged image h_I が得られるときの条件付き確率分布が $P(h_I|s_I)$ である。今、 s_I と h_I で色が異なっている格子点の割合 $\bar{\sigma}_1$ が既知であるとし、以下の拘束条件 (1.4) および規格化条件 (1.5) の下でエントロピー (1.3) を最大化することで、条件付き確率分布 $P(h_I|s_I)$ は式 (1.6) のように導くことができる。

$$S \equiv - \sum_{h_I} P(h_I|s_I) \ln P(h_I|s_I) \quad (1.3)$$

$$\frac{1}{4} \sum_i \sum_{h_i} (h_i - s_i)^2 P(h_I|s_I) = L \bar{\sigma}_i \quad (1.4)$$

$$\sum_{h_I} P(h_I|s_I) = 1 \quad (1.5)$$

$$P(h_I|s_I) = \exp \left[\left(F^{(1)} - \sum_i \frac{1}{2} (h_i - s_i)^2 \right) / T_1 \right] \quad (1.6)$$

$1/T_1$ および $F^{(1)}/T_1$ は Lagrange 未定乗数項である。

同様に、original image s_I の確率分布 $P(s_I)$ について、互いに異なる色である隣接格子対の割合 $\bar{\sigma}_2$ が既知であるとする、確率分布 $P(s_I)$ は拘束条件 (1.7) および規格化条件 (1.8) の下でエントロピー (1.6) を最大化することで式 (1.9) のように導くことができる。

$$S^{(2)} \equiv - \sum_{s_I} P(s_I) \ln P(s_I) \quad (1.6)$$

$$\frac{1}{4} \sum_{(ij)} \sum_{s_I} (s_i - s_j)^2 P(s_I) = L_2 \bar{\sigma}_2 \quad (1.7)$$

$$\sum_{s_I} P(s_I) = 1 \quad (1.8)$$

$$P(s_I) = \exp \left[\left(F^{(2)} - \sum_{(ij)} \frac{1}{2} (s_i - s_j)^2 \right) / T_2 \right] \quad (1.9)$$

$1/T_2$ および $F^{(2)}/T_2$ は Lagrange 未定乗数項である．また， L_2 は格子対の総数であり， $\sum_{(ij)}$ は全ての格子対について総和をとることを意味している．

式 (1.6) および式 (1.9) を式 (1.2) に代入することで，以下の式 (1.10) が得られる．

$$P(s_I | h_I) = \frac{\exp \left[\frac{1}{T} \left(-\frac{1}{2} J \sum_{i,j} (s_i - s_j)^2 - \frac{1}{2} \sum_i (h_i - s_i)^2 \right) \right]}{\sum_{s_I} \exp \left[\frac{1}{T} \left(-\frac{1}{2} J \sum_{i,j} (s_i - s_j)^2 - \frac{1}{2} \sum_i (h_i - s_i)^2 \right) \right]} \quad (1.10).$$

ここで， $T = T_1$ ， $J = T_1/T_2$ である．以上のようにして変分原理により導出された条件付き確率を最大化することで，求める復元画像が得られる．

組織画像に対して平均化操作を行うと画像の sharpness が失われてぼやけてしまい，再現性が低くなる．これを劣化した画像の復元問題と同種のものと考えれば，Tanaka らの用いた手法を利用して組織画像の再現性評価を行うことができると考えられる．

1.3.2 スペクトル解析

スペクトル解析とは，フーリエ変換(あるいはフーリエ級数)によって時系列データや場の量の空間変動に含まれる周波数成分の強度分布を調べる解析手法であり，周期性や類似性を定量的に評価することができる．

材料科学の分野においてもスペクトル解析は広く利用されている．例えば X 線構造解析は，X 線散乱強度は結晶の電子密度分布をフーリエ変換し，その絶対値の二乗をとることで与えられるという原理に基づいて行われる³²⁾．また，材料組織の特性化にも用いられており，Ohnuma ら³³⁾ は小角散乱によって ODS 鋼のナノスケールの酸化物サイズを定量的に評価した．さらに，顕微鏡観察によって得られた組織画像を対象とした解析も行われている．例として，Al-Ni 系合金における析出物間隔が画像のスペクトル解析によって得られている³⁴⁾．Yao ら³⁵⁾ はスペクトル解析によって 1045 鋼の破面を定量的に特徴付けた．また，Laschet ら³⁶⁾ は多孔質材の空隙の空間分布をスペクトル解析を用いて評価した．

スペクトル解析の例として、二次元組織画像の解析例を以下に示す．ある画像が輝度値の二次元分布 $I(x, y)$ として与えられているとすると、そのフーリエ変換は式(1.12)で表される．

$$H(u, v) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} I(x, y) \exp\{-2\pi i(xu + yv)\} dx dy \quad (1.11)$$

ここで、 u, v は周波数成分である．パワースペクトルは以下のように定義される．

$$P(u, v) = |H(u, v)|^2 \quad (1.12)$$

これは各周波数成分の強度を意味している．画像に周期的なパターンが含まれていれば、パワースペクトルにはそれに対応したピークが現れる．図 1.5 および図 1.6 はそれぞれ、図 1.2, 図 1.3 の組織画像から得られたパワースペクトルを示したものである．画像の中心が原点であることに注意すると、図 1.5 ではラメラ組織の配列方向、図 1.6 では粒の配置パターンに対応したパワースペクトルの分布になっていることが確認でき、それぞれの組織写真に存在する相の空間分布の情報が表れる結果となっている．

スペクトル解析は組織画像の再現性評価の手法としても利用できると考えられるが、そのような方向での研究は現在のところ報告されていない．

1.4 目的

以上のような背景の下、本研究では PFM により計算した組織について Tanaka らにより用いられた手法およびスペクトル解析により評価を行い、それが組織評価の方法として適用可能かどうかを調査することを目的とした．

本論文の構成は以下の通りである．第 2 章では、組織の時間発展を記述する PFM について概説し、規則-不規則変態による規則ドメインの成長過程および相分離過程の計算を PFM を用いて行う．第 3 章では、第 2 章の計算により得られた組織を用いて、ベイズ統計に基づく平均化操作による組織の変化の定量的評価を行う．第 4 章では、スペクトル解析による組織の変化の定量的評価を行う．第 5 章では、本論文の総括を述べる．

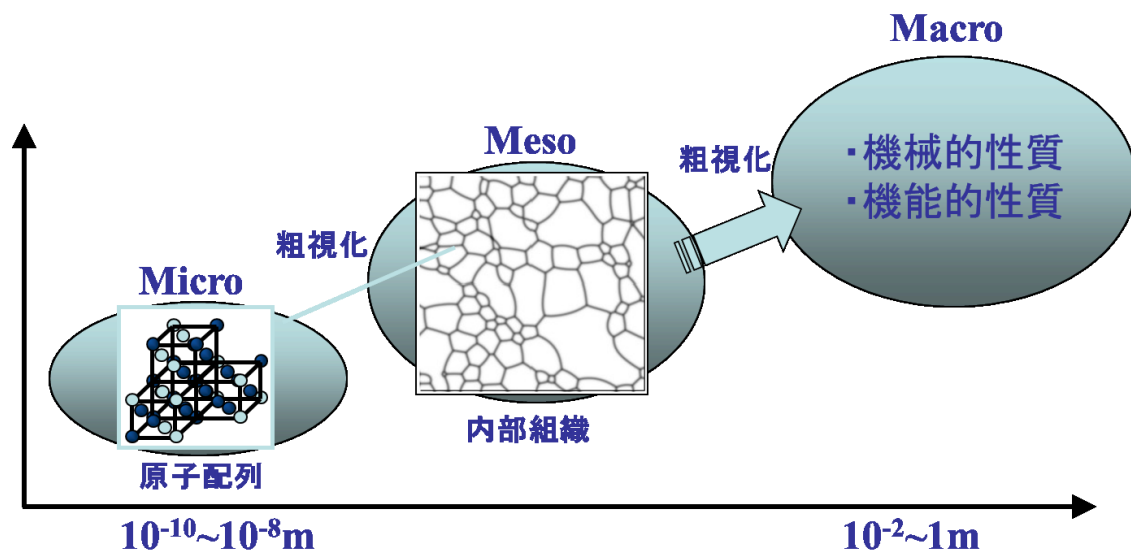


図 1.1 材料のマルチスケール性.

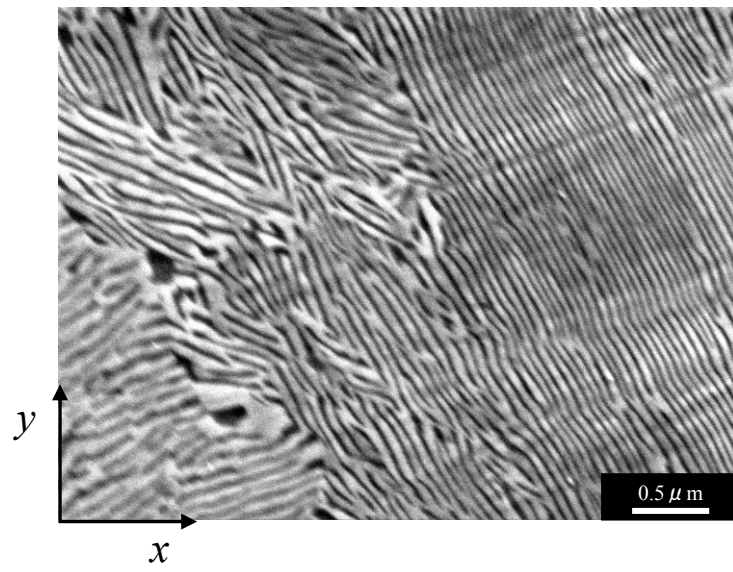


図 1.2 Fe-Mn-Al-C α/κ ラメラ組織^[1]

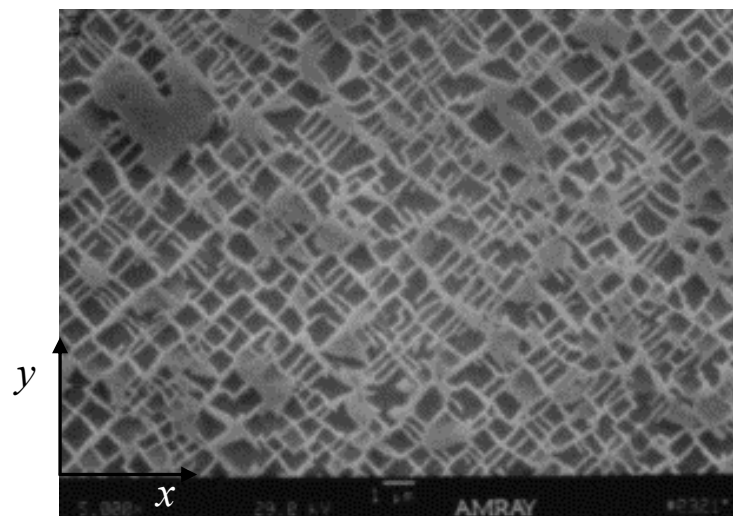


図1.3 Ni基超合金 γ/γ' 組織^[2]

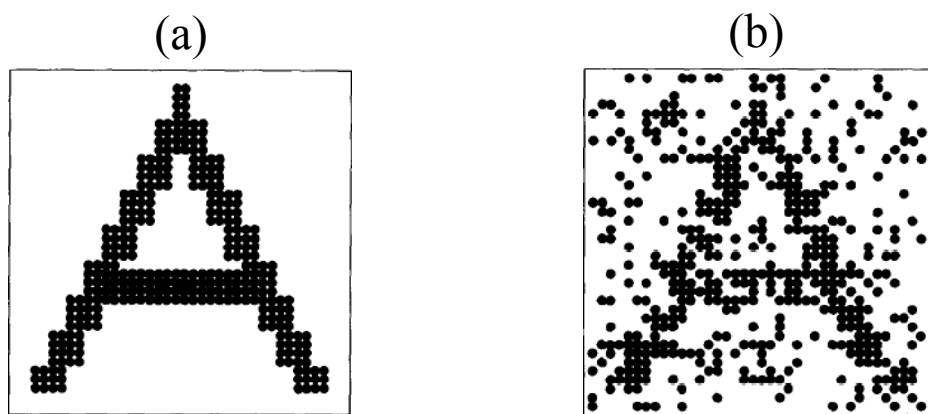


図1.4 画像の劣化^{30,31)}. (a) Original image.(b) Damaged image.

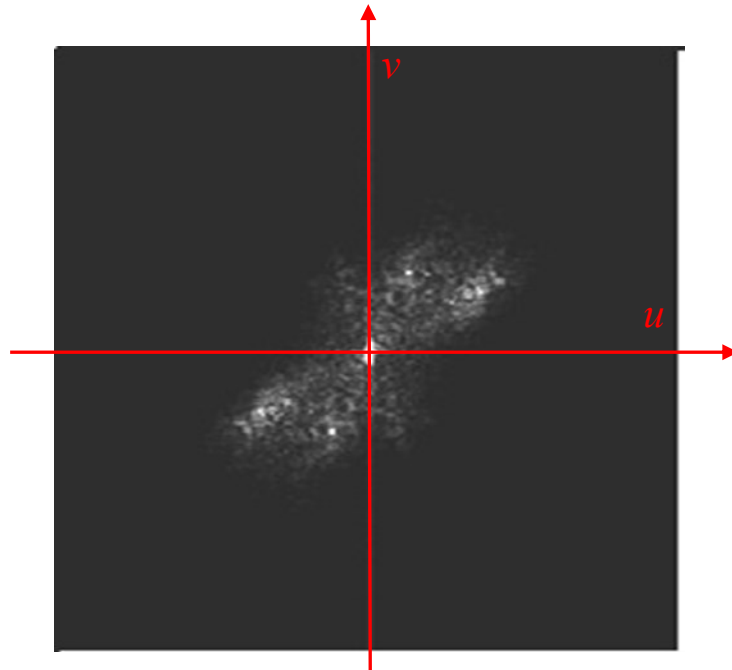


図 1.5 Fe-Mn-Al-C α/κ ラメラ組織画像^[1]のパワースペクトル

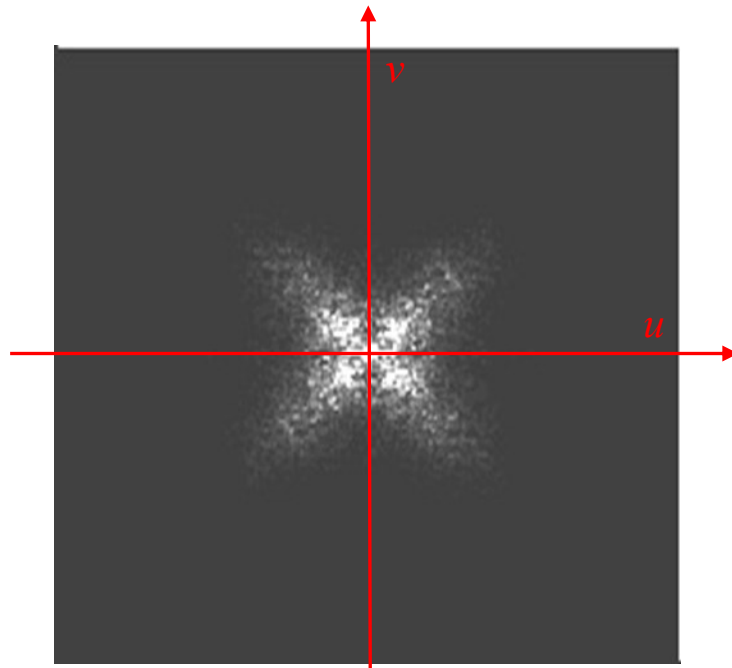


図1.6 Ni基超合金 γ/γ' 組織^[2]のパワースペクトル

2. フェーズフィールド法

本研究では、評価の対象となる組織の計算を、PFM を用いて行う。この章では、PFM について概説した後、その計算理論を説明する。そして、規則ドメインの組織発展と相分離過程の計算結果を示す。

内部組織の計算を行うことは、内部組織に存在する界面の分布を計算することに等しい。従来の取り扱いでは、界面のみに着目し界面自体の運動方程式が定式化される。この範疇においては、界面は ”sharp interface “ , つまり幅を持たない線であるとみなされる。例として、 α 母相中の β 析出物が時間と共に shrink していく様子を模式的に表した図を図 2.1 に示す。これに対して、PFM では、濃度や長距離規則度(Long-Range-Order parameter, LRO)といった空間物理量の時間発展を計算することで、内部組織の計算を行う。界面の存在は、それら空間物理量の不均一性として表現される。例として、結晶系が等しく濃度が異なる α 相と β 相の二相が共存する系を考える。 α 相の濃度を C_α , β 相の濃度を C_β とすると、この二相の間の界面は濃度が C_α から C_β へ連続的に変化する領域として表現される(図 2.2)。sharp interface model と異なり、界面が有限の幅を有するのが特徴である。図 2.3 に、空間物理量の時間発展として組織を記述した場合の模式図を示す。PFM で組織発展の計算を行う際には、空間を離散化し、それぞれの空間点における物理量を計算するが、これは pixel 上の輝度で表される画像と容易に対応付けることができ、画像処理の手法を持ち込む際に都合が良い、ということを指摘しておく。

空間物理量は濃度のような保存量と、LRO のような非保存量とに区別される。前者に対しては Cahn-Hilliard 方程式が、後者に対しては Time-Dependent Ginzburg-Landau (TDGL) 方程式が、それぞれ時間発展挙動を記述する。この二つの式を自由エネルギーに対して連立させて解くことで平衡状態へ向かうような組織の時間発展を記述する。

2.1 計算理論

この節では、PFM を用いる上で重要となる不均一系化学的自由エネルギー、および保存量・非保存量の時間発展方程式について概説する。各式の導出過程については大野の博士論文¹⁾に詳しい。

系全体の化学的自由エネルギー F_{chem} は均一系自由エネルギー密度 $f_0[c, \{\eta_i\}]$ と勾配エネルギー項の総和として与えられ、以下のようになる。

$$F_{chem} = \iiint_V \left(f_0[c, \{\eta_i\}] + \kappa_c (\nabla c)^2 + \sum_i \kappa_i (\nabla \eta_i)^2 \right) \cdot dV \quad (2.1)$$

ここで、 V は系の体積、 κ_i はある空間物理量 η_i についての勾配エネルギー係数である。時間発展過程は以下の Cahn-Hilliard 方程式と Time Dependent Ginzburg Landau 方程式に基づき計算される^{37,38)}。

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla \cdot \left\{ M \cdot \nabla \left(\frac{\delta F_{chem}}{\delta c} \right) \right\} \quad (2.2)$$

$$\frac{\partial \eta_i}{\partial t} = - \sum_j L_{ij} \cdot \frac{\delta F_{chem}}{\delta \eta_j} \quad (2.3)$$

ここで、 M および L_{ij} はそれぞれ移動度と緩和定数である。式 (2.2) の変分項は Euler-Lagrange 方程式によって以下のように微分形式に書き直すことができる。

$$\frac{\partial c}{\partial t} = M \nabla^2 \left(\frac{\partial f_0}{\partial c} - 2\kappa_c \nabla^2 c \right) \quad (2.4)$$

ここで、移動度 M は組成に依存しないものと仮定している。式 (2.3) についても同様に、

$$\frac{\partial \eta_i}{\partial t} = - \sum_j L_{ij} \left(\frac{\partial f_0}{\partial \eta_j} - 2\kappa_j \nabla^2 \eta_j \right) \quad (2.5)$$

となる。式 (2.4) は Cahn-Hilliard 方程式、式 (2.5) は、非保存量が一変数の場合、Allen-Cahn 方程式と呼ばれるものであり、それぞれ保存量と非保存量に関する TDGL 方程式と等価である。PFM では、これら二つの式を自由エネルギー密度関数 f_0 について連立させて扱う。この時、系の変態経路は最急下勾配に限定されていることに注意すべきである。これは系が平衡状態に近い場合のみ正当化される扱いである。式 (2.4) および式 (2.5) により実際に組織の時間発展の計算を行う際には有限差分法により計算され、従って組織は離散データ点上で扱われることになる。

2.2 計算結果

PFM により計算した不規則相中の規則ドメインの成長過程、相分離過程についての結果を示す。この後の章で、ここで計算された組織に対して特徴の評価を行う。

2.2.1 計算手法

本節では、系の熱力学的状態が濃度 c [V^{-1}] および LRO η のみによって区別される系

を考え、規則-不規則変態によって組織発展が進行していく場合の計算を行う。規則-不規則変態を記述する自由エネルギー密度関数として、ここでは Landau 展開による多項式近似³⁹⁾を採用した。

$$f_0[c, \eta] = \frac{1}{2}A \cdot (c' - c)^2 + \frac{1}{2}B \cdot (c'' - c) \cdot \eta^2 - \frac{1}{4}D \cdot \eta^4 + \frac{1}{6}E \cdot \eta^6 \quad (2.6)$$

ここで、 A, B, D, E, c', c'' は現象論的定数である。式 (2.6) は温度の項を陽に含んでいないが、各定数の値を適宜調整することで規則-不規則変態に関する自由エネルギー曲線を再現することができる。本研究では議論を簡便化するために、 $\eta = 0.0$, $c = 0.2$ の不規則相, $\eta = \pm 1.0$, $c = 0.8$ の規則相の所で等しく極値 0 をとるように各定数の値を設定した。各定数の値はそれぞれ、 $B/A = 1.2$, $D/A = E/A = 1.2$, $c' = 0.2$, $c'' = 0.8$ と与えている。なお、有限温度においてはエントロピーの効果により平衡状態の規則相の LRO は 1.0 にはならないことに注意すべきである。図 2.4 に、この自由エネルギーの等高線図を示す。

式 (2.4) の Cahn-Hilliard 方程式と式 (2.5) の TDGL 方程式(この場合は一変数のため Allen-Cahn 方程式)を、式 (2.6) の自由エネルギー密度関数について連立させると、

$$\frac{\partial c}{\partial t'} = M^* \nabla^2 \left(\frac{\partial f_0^*[c, \eta]}{\partial c} - \kappa^* \nabla^2 c \right) \quad (2.7)$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial t'} = - \left(\frac{\partial f_0^*[c, \eta]}{\partial \eta} - \nabla^2 \eta \right) \quad (2.8)$$

となる。ここで、

$$t' = A \cdot L \cdot t \quad (2.9)$$

$$x' = x \sqrt{A/(2\kappa_\eta)} \quad (2.10)$$

$$M^* = MA/(2\kappa_\eta L) \quad (2.11)$$

$$\kappa^* = \kappa_c/\kappa_\eta \quad (2.12)$$

$$f_0^*[c, \eta] = f_0[c, \eta]/A \quad (2.13)$$

として、全て無次元化してある。

2.2.2 規則-不規則変態による規則ドメイン成長過程の計算

図 2.4 を見ると、不規則相と規則相の間には自由エネルギー障壁が存在していることがわかる。このときの規則-不規則変態は一次変態であり、自発的に進行しない。よって、変態が開始されるためには熱ゆらぎが必要である。本計算では陽にゆらぎを定式化する代わりに、乱数を用いて規則ドメインの核をランダムに配置した状態を初期条件として、式 (2.7) および式 (2.8) により組織の時間発展の計算を行った。計算条件は、メッシュサイ

ズ 256×256 , 周期的境界条件とした. 各パラメーターの値は, $M^* = 1.0$, $\kappa^* = 1.0$ とし, 平均組成は 0.5 として与えた. 図 2.5 に, 計算結果を示す. 本論文では, 計算により得られた組織はすべて LRO の空間分布として表示する. これは, 暗視野画像の強度が $|\eta|^2$ に比例することから, 電子顕微鏡による規則ドメインの成長過程の観察と対応させるためである.

図 2.5 (a)-(e) は, それぞれ時刻 $t' = 0.0, 3.0, 7.0, 11.0, 30.0$ の時の組織の LRO η の空間分布を示している. 図の横軸と縦軸はそれぞれ, 無次元化した x' 座標および y' 座標である. LRO の値は図 2.5(a)のグレースケールに示されており, 白い領域が規則相, 黒い領域が不規則相を表している.

この系の平衡状態における規則相と不規則相の体積率は $1:1$ であり, 規則相と不規則相を隔てる異相境界(Interphase Boundary, IPB)の移動によって時間と共に規則ドメインが粗大化して平衡体積率へと向かう. 系が平衡体積率へ達した後は, 小さな規則ドメインが縮小, 消失し, 大きな規則ドメインが増々粗大化するという, いわゆるオストワルド成長が起きていることが確認できる. 析出粒子の母相に対する溶解度は以下の Thomson-Freundlich の式⁴⁰⁾により, その粒子半径 r に依存することがわかる.

$$RT \ln \frac{X_i(r)}{X_i(\infty)} = \frac{2\bar{V}_i\sigma}{r} \quad (2.14)$$

ここで, R は気体定数, T は温度, σ は界面張力である. また, $X_i(r)$ および $X_i(\infty)$ はそれぞれ, 粒子半径 r と半径 ∞ の場合における成分 i の母相中への溶解度であり, $\bar{V}_i$ は成分 i のモル体積である.

式(2.14)により, サイズの異なる粒子間には濃度勾配が生じ, 小さな粒子から大きな粒子へ溶質が拡散することで小さな粒子は溶解し, 大きな粒子は粗大化していく. このようにして, 系全体の自由エネルギーを減少させながら組織の特徴は時々刻々と変化していく.

2.2.3 相分離過程の計算

2.2.2 節の場合とは異なる初期条件を与え, $c = 0.4$, $\eta = 0.577$ の均一な系に対して微小な濃度ゆらぎを加えた状態から計算を行った. その他の計算条件は 2.2.2 節と同様である.

図 2.6 (a)-(e) は, それぞれ時刻 $t' = 0.0, 8.0, 12.0, 16.0, 24.0$ の時の組織の LRO η の空間分布を示している. 均一な状態から特定の波長を持ったゆらぎが優先的に増幅され, 規則相と不規則相に分離していく様子が確認でき, 相分離過程において典型的な変調構造が形成されていることがわかる.

ここで見られる相分離過程は規則化を伴うものであり, Fe-Al^{41,42)}, Cu-Mn-Al⁴³⁾, Cu-Zn⁴⁴⁾ 合金などで報告されている. このような現象は, 相互作用パラメーターの正負によって相分離と規則化の内どちらか一方が起こる単純なモデルでは説明できず, 第二近接対, 第三

近接対の相互作用まで考慮に入れることではじめて理解されるものである⁴⁵⁾。ただし、本研究で用いている自由エネルギー関数 (2.6) は現象論的なモデルであり、実際に原子の相互作用エネルギーを考慮しているわけではないことに注意すべきである。

2.3 結言

本章では、PFM 理論の核となる不均一系化学的自由エネルギーおよび Cahn-Hilliard 方程式と Allen-Cahn 方程式により記述される時間発展原理について概説した。以上のように、PFM により計算した組織画像は実材料の組織と同様な特徴を有していて、なおかつ実際の顕微鏡による組織観察の際に意図せず入ってしまう種々のノイズが含まれていない。そのため、本研究ではこのような計算組織画像を評価の対象として選んだ。第 3 章、第 4 章では組織の特徴、あるいは特徴の変化を定量的に評価する方法について議論していく。

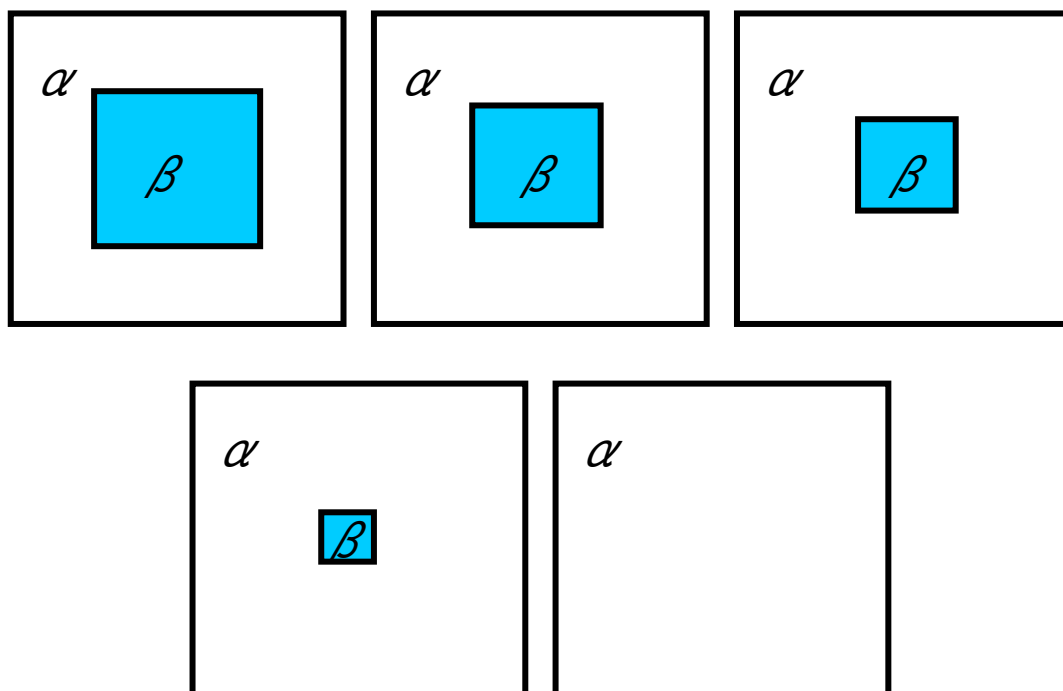


図 2.1 析出物の shrink 過程(sharp interface model)

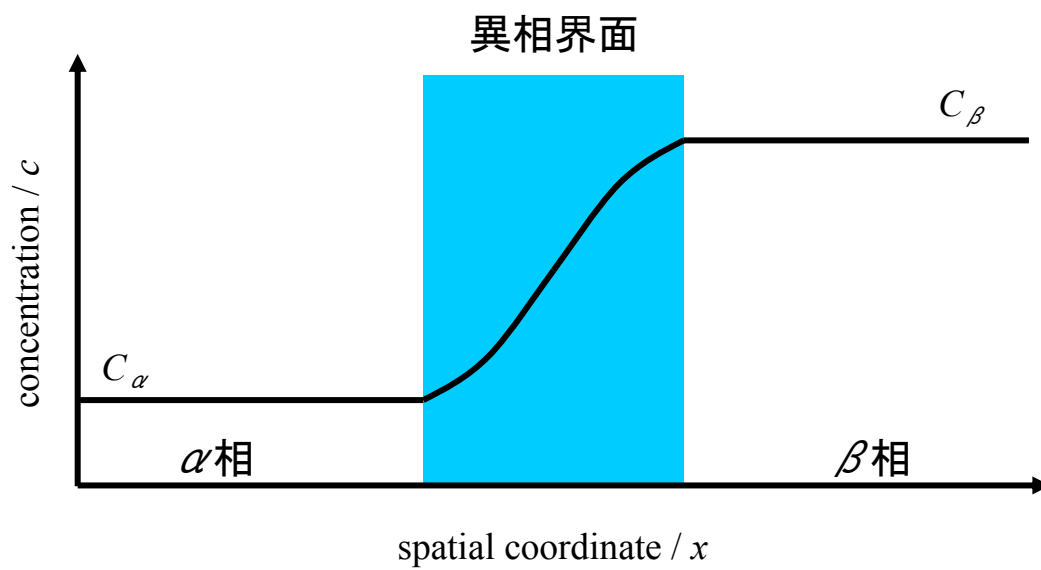


図 2.2 α - β 界面近傍の濃度プロファイル

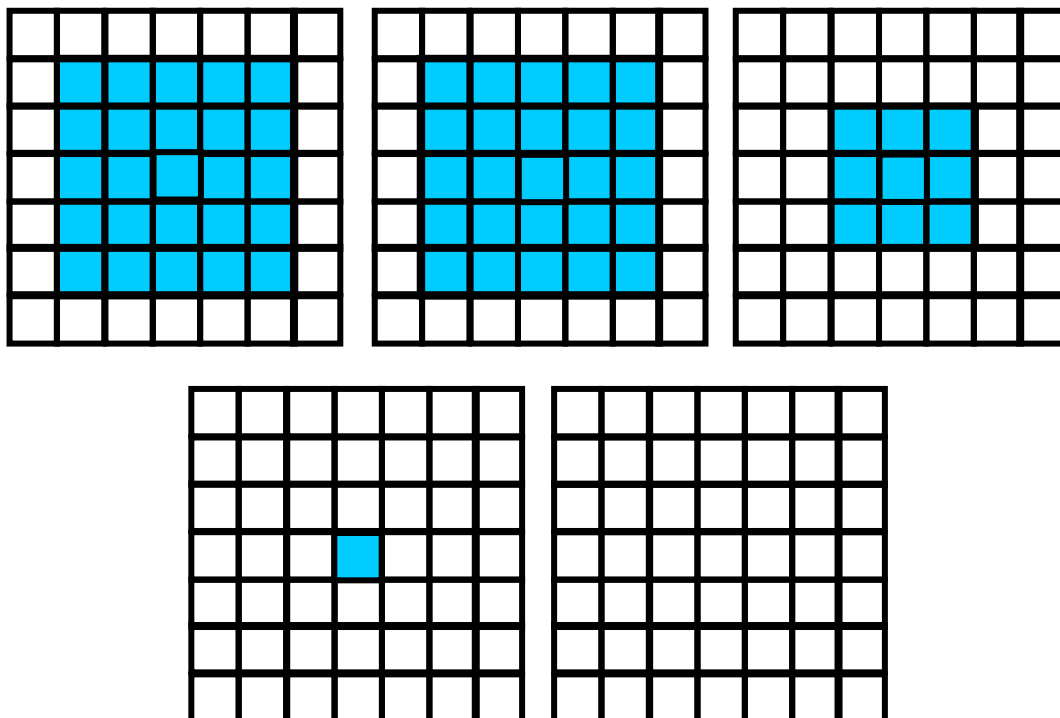


図 2.3 析出物の shrink 過程(diffuse interface description)

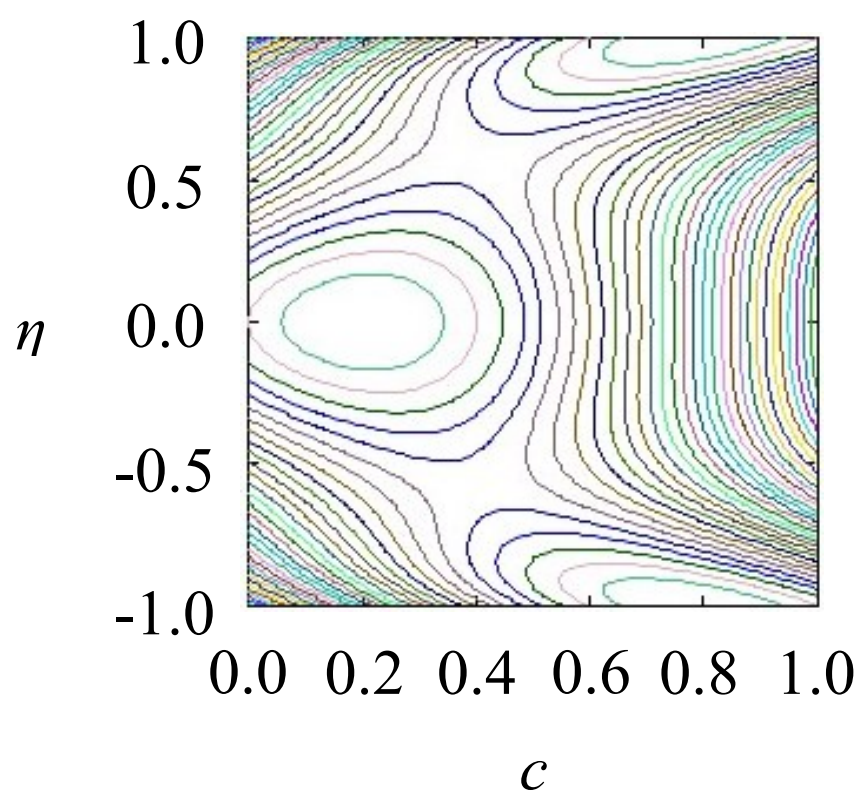


図 2.4 $f_0[c, \eta]/A$ の等高線図

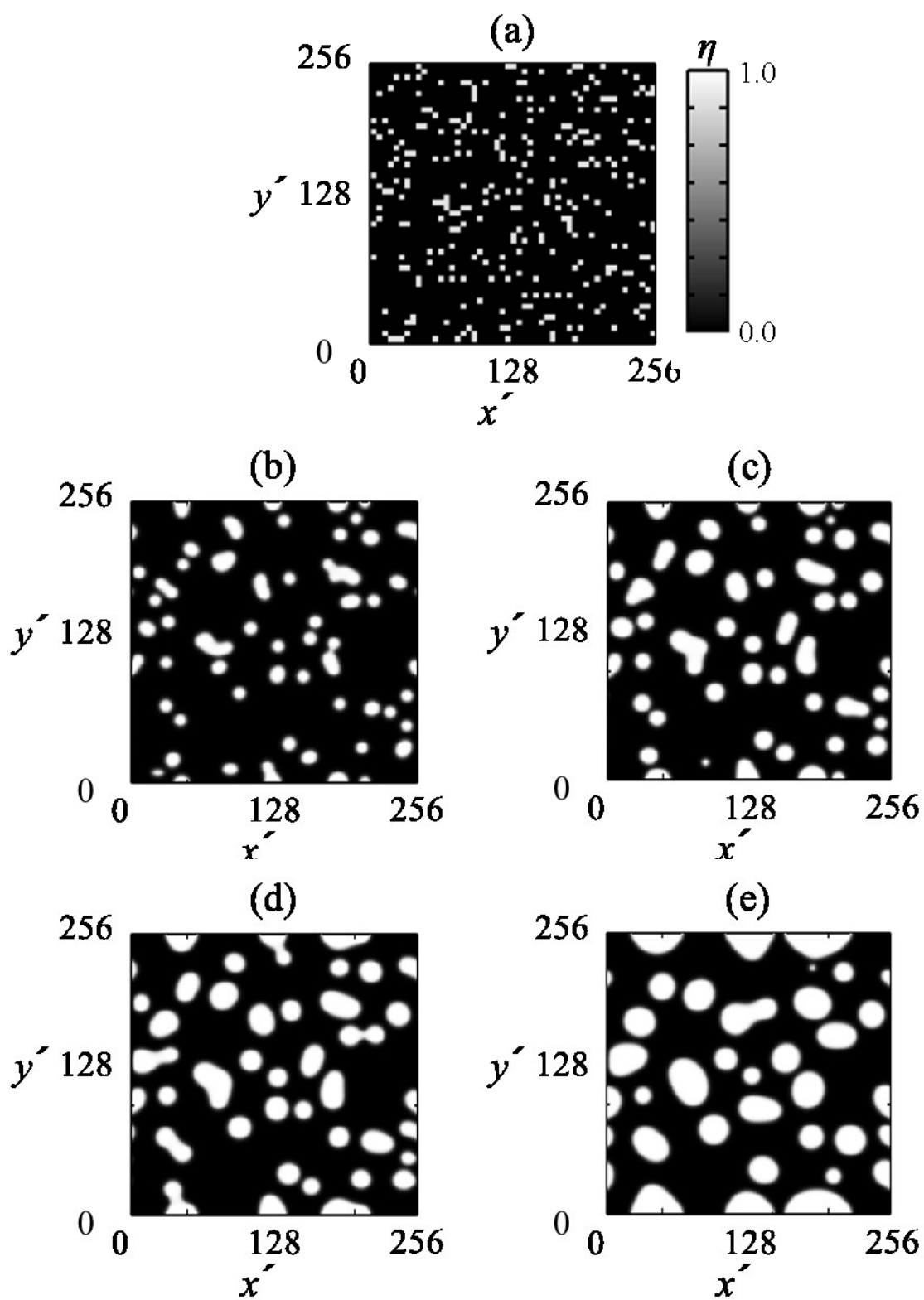


図 2.5 規則-不規則変態中の組織の時間発展.

(a) $t' = 0.0$ (b) $t' = 3.0$ (c) $t' = 7.0$ (d) $t' = 11.0$ (e) $t' = 30.0$

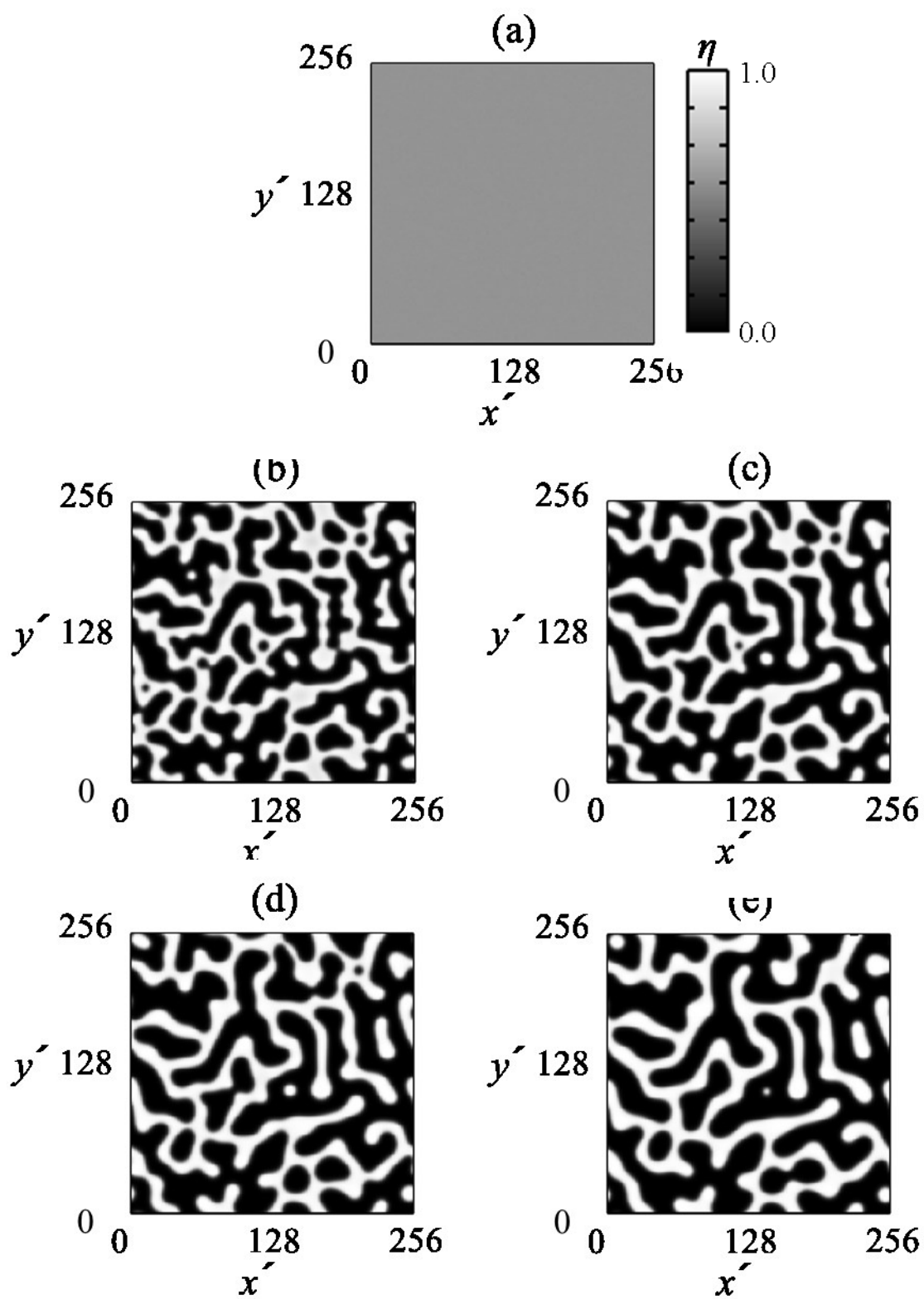


図 2.6 相分離過程における組織の時間発展.

(a) $t' = 0.0$ (b) $t' = 8.0$ (c) $t' = 12.0$ (d) $t' = 16.0$ (e) $t' = 24.0$

3. 変分原理に基づく組織の特徴の評価

前章では、不規則中における規則ドメインの成長過程および相分離過程の時間発展挙動をフェーズフィールド法により計算した。その時間発展過程では組織の特徴は時々刻々と変化していく。本章では、Tanaka ら^{30,31)}により画像復元に用いられた変分原理に基づく統計力学的手法を応用した、組織の特徴の変化の定量的評価方法について述べる。そして、その方法を用いて、前章で得られた組織の計算結果に対して実際に組織の特徴の変化を評価していく。第 1 章で述べたように、マルチスケール計算における粗視化を行うと、材料の内部組織の詳細な情報が失われる。そこで、本研究では平均化操作を行うことで組織にどの程度の変化が起こるかを評価した。

3.1 組織の変化の評価方法

1.3.1 節で述べたように、ベイズ統計⁴⁶⁾における復元画像の条件付き確率は式 (1.10) で表すことができる。式 (1.10) を見ると、統計力学における Gibbs 分布⁴⁷⁾と数学的に同等の式であることがわかる。よって、 T を温度、 J を原子間相互作用エネルギーとみなすことで、**damaged image** で与えられる不均一外場下におけるイジングモデルの場合と同等と考えることができる。その系の自由エネルギーを最小化することで最大確率の分布が求められ、復元画像が得られる。

ここでは、自由エネルギー式の記述に CVM を用いる。CVM では、自由エネルギーの変数に多体のクラスター濃度を導入して、広範な原子間相関を考慮したエントロピーの定式化を行うことができる。Bragg-Williams 近似^{48,49)} や Bethe 近似⁵⁰⁾ といった近似手法は CVM に包括されるものであり、CVM の範疇においてはそれぞれ点近似、対近似と呼ばれる。

CVM の対近似により記述されたイジングモデルの自由エネルギーは以下のようになる。

$$F = E\{\rho_i(s_i), \rho_{ij}(s_i, s_j)\} - TS\{\rho_i(s_i), \rho_{ij}(s_i, s_j)\} \quad (3.1)$$

ここで、 $\rho_i(s_i)$ は格子点 i における s_i の点確率、 $\rho_{ij}(s_i, s_j)$ は格子対 ij における s_i, s_j の対確率である。式 (3.2) の自由エネルギーに関して、simulated annealing⁵¹⁾により逐次的にパラメーター T を減少させていくことで図 3.1 (c)-(f) の復元画像が得られる。

復元画像の original image に対する復元率を表すものとして、ここでは

$$R = \frac{1}{4L} \sum_i [s_i^{(0)} - \text{sign}(\langle s_i \rangle_i)]^2 \quad (3.2)$$

$$R_2 = \frac{1}{4L_2} \sum_{ij} [\text{sign}(\langle s_i \rangle_i) - \text{sign}(\langle s_j \rangle_j)]^2 \quad (3.3)$$

なるパラメーターを用いている。 $\text{sign}(x)$ は $x > 0$

のとき 1 , $x = 0$ のとき 0, $x < 0$ のとき -1 となる関数である. 上付き文字 (0) は original image の値であることを意味している. また,

$$\langle s_i \rangle_i = \sum_{s_i=\pm 1} s_i \rho_i(s_i) \quad (3.4)$$

である. R は ρ_i について, R_2 は ρ_{ij} について original image と比較したパラメーターとなっており, 復元画像が original image に近づくほど R の値は 0 に, R_2 の値は $\bar{\sigma}_2$ に近づく. $\bar{\sigma}_2$ は original image における全格子対に対する黒・白対の割合である. damaged image で与えられた条件の下で R, R_2 を最小にするような画像が, 求める復元画像となる. この R および R_2 というパラメーターによって組織の再現性を評価するのが本研究で提案する組織の評価方法である.

3.1.1 画像再現度のパラメーター R, R_2

本研究では, Tanaka, Morita ら^{30,31)}が画像処理の研究の中で用いた, 画像の再現度を評価するパラメーター R, R_2 を参考にし, 次のようなパラメーターを定義する.

$$R = \frac{1}{L} \sum_i \left(s_i^{(0)} - s_i^{(1)} \right)^2 \quad (3.5)$$

$$R_2 = \frac{1}{L_2} \sum_{ij} \left(s_{ij}^{(0)} - s_{ij}^{(1)} \right)^2 \quad (3.6)$$

ここで, L は格子点の総数, L_2 は格子対の総数である. また, s_i は格子点 i における LRO η の値, s_{ij} は格子対 ij における η 勾配の大きさであり, 上付き文字 (0) と (1) は比較する二種類の組織画像を区別するものである. R は平均化前後での η の値の差をすべての格子点について和を取ったもので, LRO の空間分布の変化量を表すパラメーターとなっている. また, R_2 は平均化前後での η 勾配の値の差をすべての格子対について和を取ったもので, LRO の空間勾配の変化量を表すパラメーターである. 二つの組織の異なり度合いが大きくなるほど R および R_2 の値は大きくなる. R が 0 のとき, 二つの画像は完全に一致しているが, R_2 が 0 の場合には一致しているとは限らないということに注意すべきである(例えば, 勾配の存在しない規則相の均一系と不規則相の均一系の組織画像を比較したとき, この二つは明らかに異なるが R_2 の値は 0 となる).

3.1.2 平均化操作

本研究では、組織の平均化の方法として移動平均法、およびガウシアンフィルタを用いた⁴⁶⁾。移動平均法ではある格子点を中心とした局所領域内の単純平均を取り、ガウシアンフィルタではガウス関数で重み付けした加重平均を取る。この操作をすべての格子点について行うことでフィルタリングを施し、組織を平滑化する。平均化前の組織のある格子点 (i, j) における長距離規則度(Long-Range-Order parameter, LRO)を $f(i, j)$ 、平均化後の組織の格子点 (i, j) における LRO を $g(i, j)$ とすると移動平均の式は、

$$g(i, j) = \sum_{m=-[l/2]}^{[l/2]} \sum_{n=-[l/2]}^{[l/2]} \frac{1}{l^2} f(i + m, j + n) \quad (3.7)$$

である。ここで、 $[l/2]$ は $l/2$ を超えない最大の整数を表し、 l は奇数であるとする。以後、 l を平均化領域サイズと呼称する。

ガウシアンフィルタの式は以下のように与えられる。

$$g(i, j) = \sum_{m=1}^N \sum_{n=1}^N \frac{1}{2\pi\sigma^2} \exp\left(-\frac{(i-m)^2 + (j-n)^2}{2\sigma^2}\right) f(m, n) \quad (3.9)$$

ここで σ^2 は分散を表している。この平均化操作では、 σ^2 の値が大きくなるほどより大きな平均化となる。

何らかの平均化操作により内部組織を粗視化していった場合、内部組織の詳細な情報が失われてしまう。そのときの内部組織の特徴の変化を移動平均法やガウシアンフィルタといった単純な平均化操作により再現しようというのが、本研究において組織の平滑化を行ったねらいである。ただし、ここで行った平均化操作は、系のミクロスケールの記述から始め、そのスケールにおける現象を支配する自由エネルギーの数学的形式が不変に保たれるように平均化し、より大きなスケール域へ情報を伝達していくという厳密な意味での粗視化を行っているわけではないということに注意すべきである。

以下では、パラメーター R , R_2 を用いて、組織の特徴の平均化操作による変化を定量的に評価していく。

3.1.3 平均化操作による組織の変化の評価方法

2.2.2 節で行った規則-不規則変態による規則ドメインの成長過程の計算で得られた時刻 $t' = 7.0$ と $t' = 30.0$ のときの組織、および 2.2.3 節で行った相分離過程の計算で得られた

時刻 $t' = 24.0$ のときの組織を用いて、平均化操作による組織の特徴の変化を評価した。以後、それぞれの組織を組織①、組織②、組織③と呼称する。評価は、パラメーター R , R_2 を用いて、平均化操作前の組織と平均化領域サイズ l ($l = 1, 3, 5, \dots, 81$) で移動平均を行った後の組織、あるいは分散 σ^2 ($\sigma^2 = 0.0 \sim 200.0$) でガウシアンフィルタを施した組織とを比較するという方法で行った。

3.2 結果

3.2.1 移動平均による組織の変化の評価結果

図 3.2 は組織①~③に関して移動平均を行ったときの平均化領域サイズ l とパラメーター R の関係を示したものである。グラフ中の実線と点線（黒：組織①，赤：組織②，青：組織③）がそれぞれの組織についての R の値とその二階微分の値を表している。平均化領域サイズ l のときの二階微分の値として、二階差分 $u(l-1) - 2u(l) + u(l+1)$ をとった。ここで、 $u(l)$ は平均化領域サイズ l のときの R の値である。グラフ中の黒の太線と交わる所で二階微分の値は 0 となり変曲点をとる。

図 3.3 (a)~(c) は組織①と、それに対して平均化操作を行った後の組織を示した LRO の空間分布であり、それぞれ (a) $l = 1$ (平均化前), (b) $l = 11$, (c) $l = 27$ のときの組織を示している。(a)と(b)を比較すると、平均化により sharpness が低減され規則ドメインの輪郭がぼやけていることがわかるが、それ以外の組織の特徴の変化は確認できない。平均化領域サイズをさらに大きくした (c) になると、ほとんど全ての規則ドメインがつぶれて消えてしまっていることが確認される。図 3.4 (a)~(d)は組織②と、それに対して移動平均を行った後の組織を示した LRO の空間分布であり、それぞれ(a) $l = 1$ (平均化前), (b) $l = 11$, (c) $l = 27$, (d) $l = 35$ のときの組織を示している。(b) のときには勾配が緩やかになること以外の大きな変化は確認されなかった。(c)になると比較的小さな規則ドメインがつぶされて消えてしまっていたり、規則ドメイン間の境界がぼやけてそれぞれがつながっているのが確認されるが、組織の大まかな特徴はまだ残っている。(d)では組織②の元の特徴がほとんど失われてしまっている。このときの図 3.2 の R の値を見ると、組織①、②のどちらの場合も平均化領域サイズ l に対して単調増加し、 l が大きくなるほど元の組織からの変化が大きくなっていることがわかる。ここで R の変化挙動に注目すると、図 3.3(b) から (c) への組織の変化や図 3.4(c)から(d)への組織の変化に対応するように、図 3.2 の R の二階微分の値は変曲点をとっている。さらに、組織②に対しての R の二階微分の値は、組織①の場

合に比べてより大きな l の値の所で変曲点をとっていることがわかる。これは、規則ドメインが成長して大きくなっているためであると考えられる。図 3.5 (a)-(d)は組織③と、それに対して移動平均を行った後の組織を示した LRO の空間分布であり、それぞれ(a) $l = 1$ (平均化前), (b) $l = 11$, (c) $l = 27$ (d) $l = 41$ のときの組織を示している。(b) のときには境界がぼやける以外の大きな変化は確認されなかったが、(c) になると元の組織の特徴が大きく失われてしまっていることがわかる。これに対応するように図 3.2 の組織③についての R の二階微分の値も変曲点をとっており、組織①, ②のときと同様に R の変化挙動は組織の特徴の変化に対応していることがわかるが、先の場合とは異なり R の値は平均化領域サイズに対して単調増加しているわけではないことに注意すべきである。これは、移動平均法では平均化領域サイズと同程度の長さスケールを持つ周期性が強められるためであり、組織③のような強い周期性を持つ組織ではこのことがより顕著に表れる。また、図 3.5(d)では x' 軸方向と y' 軸方向に沿った周期性だけが残って、対角線方向の周期性が失われていることが確認できるが、これは今回用いた平均化領域の形状が正方形であるため対角線方向に大きく平均化されてしまった結果である。このように平均化を行う際のメッシュ形状に依存してしまうために等方的な平均化を行うことが困難であることも移動平均法の特徴である。図 3.6 は図 3.2 と同様に、平均化領域サイズ l とパラメーター R_2 の関係を示したものである。これを見ると、組織①-③のそれぞれの R_2 の変化挙動は類似したものとなっており、変曲点の位置はほぼ同じである。図 3.7(a), (b)に組織①の LRO の空間勾配の分布と、組織①に対して平均化領域サイズ $l = 11$ で移動平均を行ったときの LRO の空間勾配の分布を示す。図 3.8(a), (b) はそれぞれ図 3.7(a), (b)中の白線に沿った LRO プロファイルである。平均化操作により LRO 勾配の大きな領域がつぶされ、界面についての情報が失われていることがわかる。組織①-③はすべて同じ界面幅を有しているため、 R_2 の変化挙動はいずれの組織に対しても変わらなかったと考えられる。

3.2.2 ガウシアンフィルタによる組織の変化の評価結果

図 3.9 と図 3.10 は組織①~③に関してガウシアンフィルタを行ったときの分散 σ^2 の値とパラメーター R , R_2 のそれぞれの関係を示したものである。 σ^2 の値が大きくなるほど R , R_2 の値が大きくなる傾向は移動平均の場合と同様であるが、ガウシアンフィルタの場合は組織③に対しても単調増加を示している。図 3.11(a)-(c)は組織①と、それに対してガウシアンフィルタ操作を行った後の組織を示した LRO の空間分布であり、それぞれ (a) $\sigma^2 = 0.0$ (平均化前), (b) $\sigma^2 = 4.0$, (c) $\sigma^2 = 43.6$ のときの組織を示している。図 3.12(a)-(c)は組織②と、それに対してガウシアンフィルタ操作を行った後の組織を示した LRO の空間分布であり、それぞれ (a) $\sigma^2 = 0.0$ (平均化前), (b) $\sigma^2 = 4.0$, (c) $\sigma^2 = 77.4$ のときの

組織を示している．図 3.13(a)・(d)は組織③について同様に，それぞれ (a) $\sigma^2 = 0.0$ (平均化前)，(b) $\sigma^2 = 4.0$ ，(c) $\sigma^2 = 43.6$ (d) $\sigma^2 = 148.9$ のときの組織を示している． R_2 の変曲点を越えた付近の (b) の場合ではどの組織も規則相と不規則相の界面の勾配が緩やかになる以外の変化は認められないが，それぞれの R の変曲点を越えた (c) の場合では移動平均の場合ほど顕著ではないが規則ドメイン間の境界がぼやけてつながっているように見えるなどの特徴の変化が確認できる．また，図 3.13(d)に注目すると，ガウシアンフィルタでは図 3.4(d)のように対角線方向に大きく平均化されることなく等方的な平均化操作になっていることがわかる．

3.3 結言

本章では，組織評価のパラメーターとして，画像の再現度を表すパラメーター R ， R_2 を導入した．第 2 章で計算した組織の画像に対して移動平均およびガウシアンフィルタリング操作を行い，平均化操作前後の組織の再現度を R ， R_2 を用いて評価した．その結果， R および R_2 の平均化領域サイズ l あるいは分散 σ^2 に対する変化挙動は，規則ドメインの消失や結合，界面といった組織の特徴の何らかの変化に対応するものであることが示唆され，平均化操作を行った際の R および R_2 の値は一般的な組織における粒径や粒の空間分布，界面幅に依存するものと予測される．移動平均法およびガウシアンフィルタにより平均化された組織はどちらの場合も平均化の程度が大きくなるほど組織の再現性が失われるという傾向は同じであったが，移動平均法では特定の周期性が強調される，メッシュ形状に依存して等方的な平均化にならないといった問題があることがわかった．また， R および R_2 により組織の特徴が失われない適切な平均化の程度を求めることができると考えられるが，明確な criteria を与えるものではなく，より定量的に組織画像の特徴量を評価できる手法が望まれる．次章では，画像の定量的評価法として広く応用されているスペクトル解析により平均化前後の組織の再現性評価を行っていく．

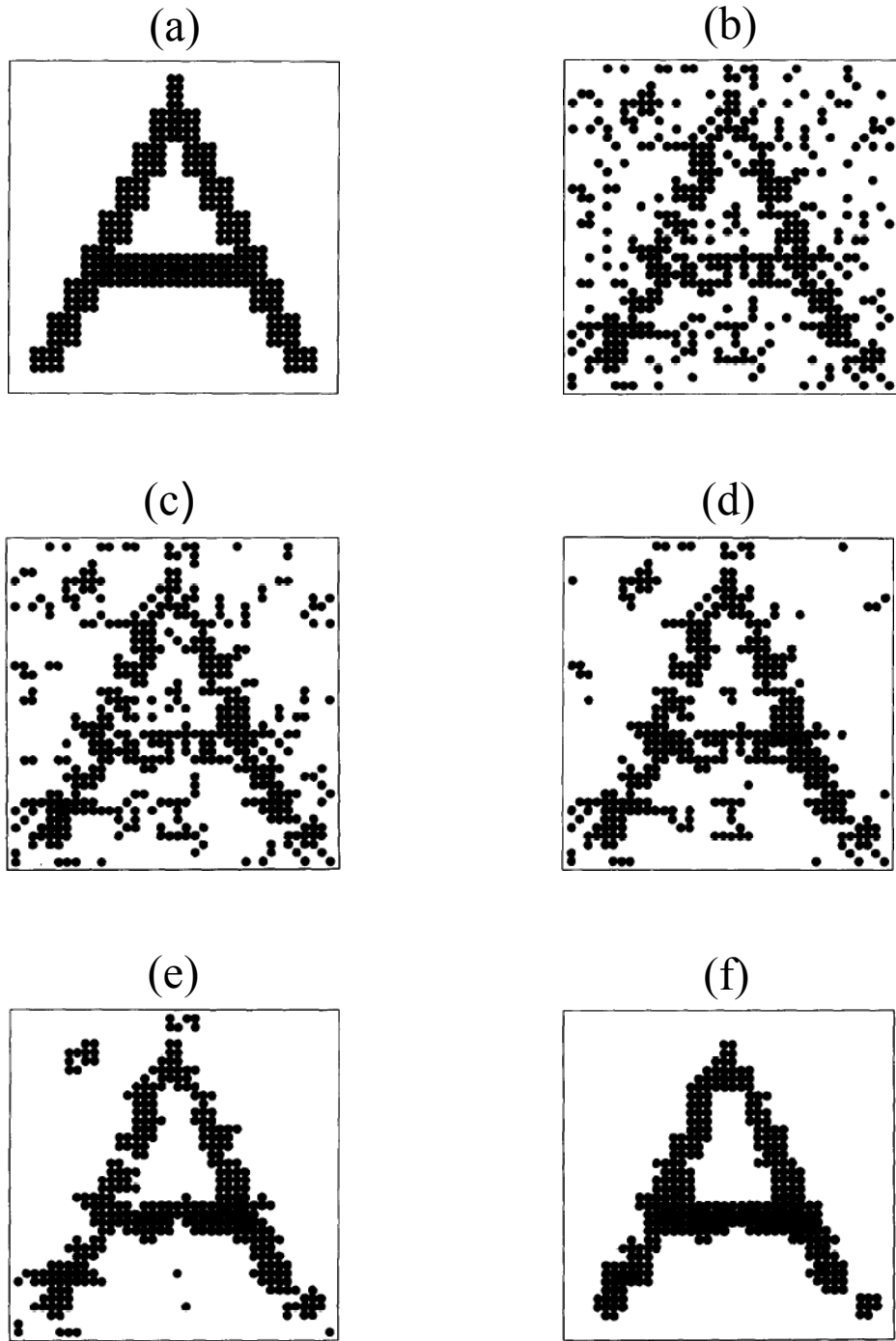


図3.1 画像の復元^{30,31)}. (a) Original image.($\bar{\sigma}_2 = 0.07539$) (b) Damaged image.
(c) $T = 4.00$ ($R = 0.18213$, $R_2 = 0.28805$), (d) $T = 3.00$ ($R = 0.12327$, $R_2 = 0.19275$)
(e) $T = 2.00$ ($R = 0.08310$, $R_2 = 0.12020$), (f) $T = 0.40$ ($R = 0.05956$, $R_2 = 0.07752$)

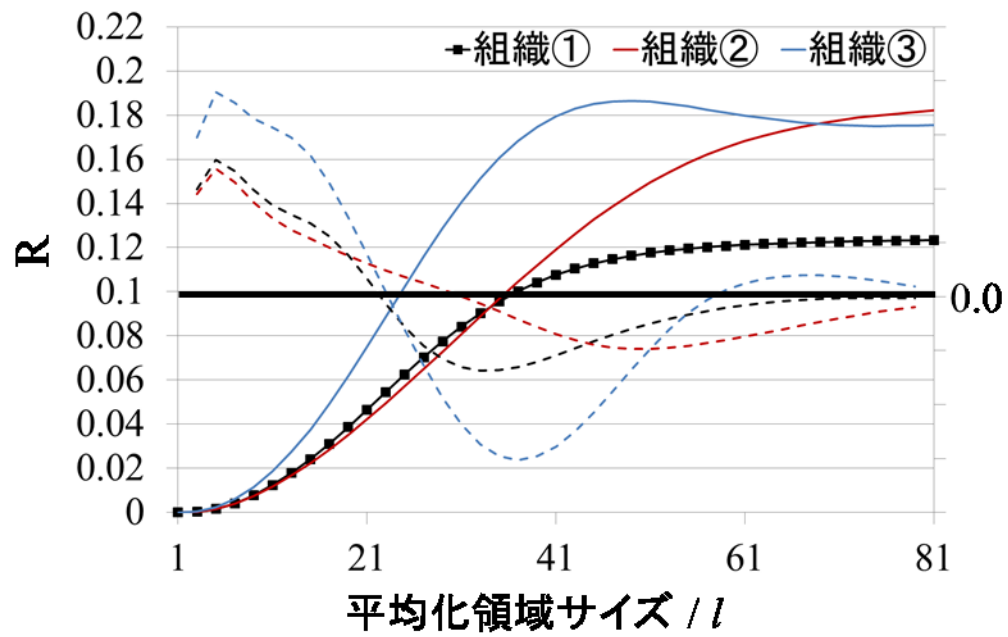


図 3.2 平均化領域サイズ l に対する R の変化. (移動平均)

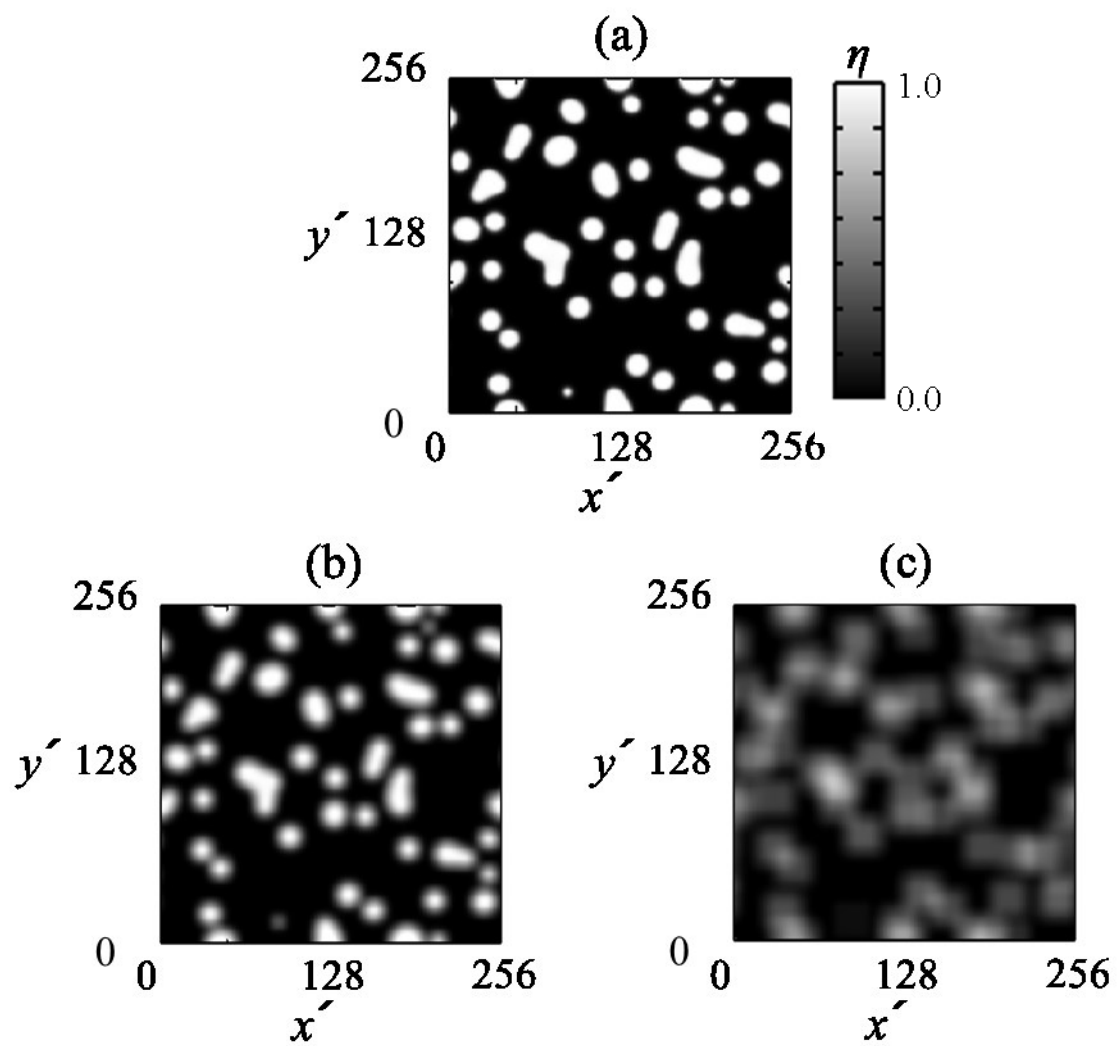


図 3.3 移動平均による組織①の LRO の空間分布の変化.

(a) $l = 1$ (b) $l = 11$ (c) $l = 27$

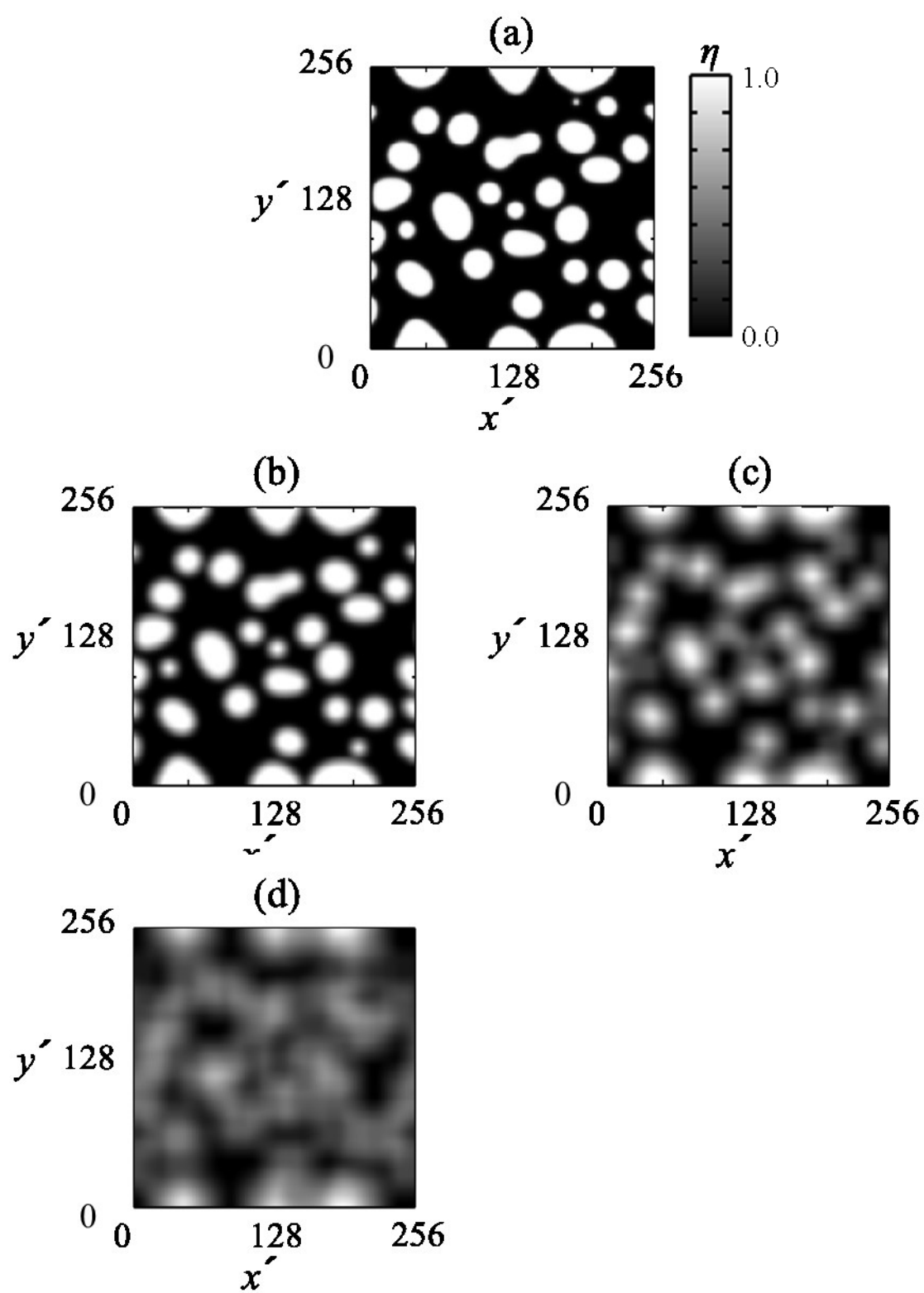


図 3.4 移動平均による組織②の LRO の空間分布の変化.

(a) $l = 1$ (b) $l = 11$ (c) $l = 27$ (d) $l = 35$

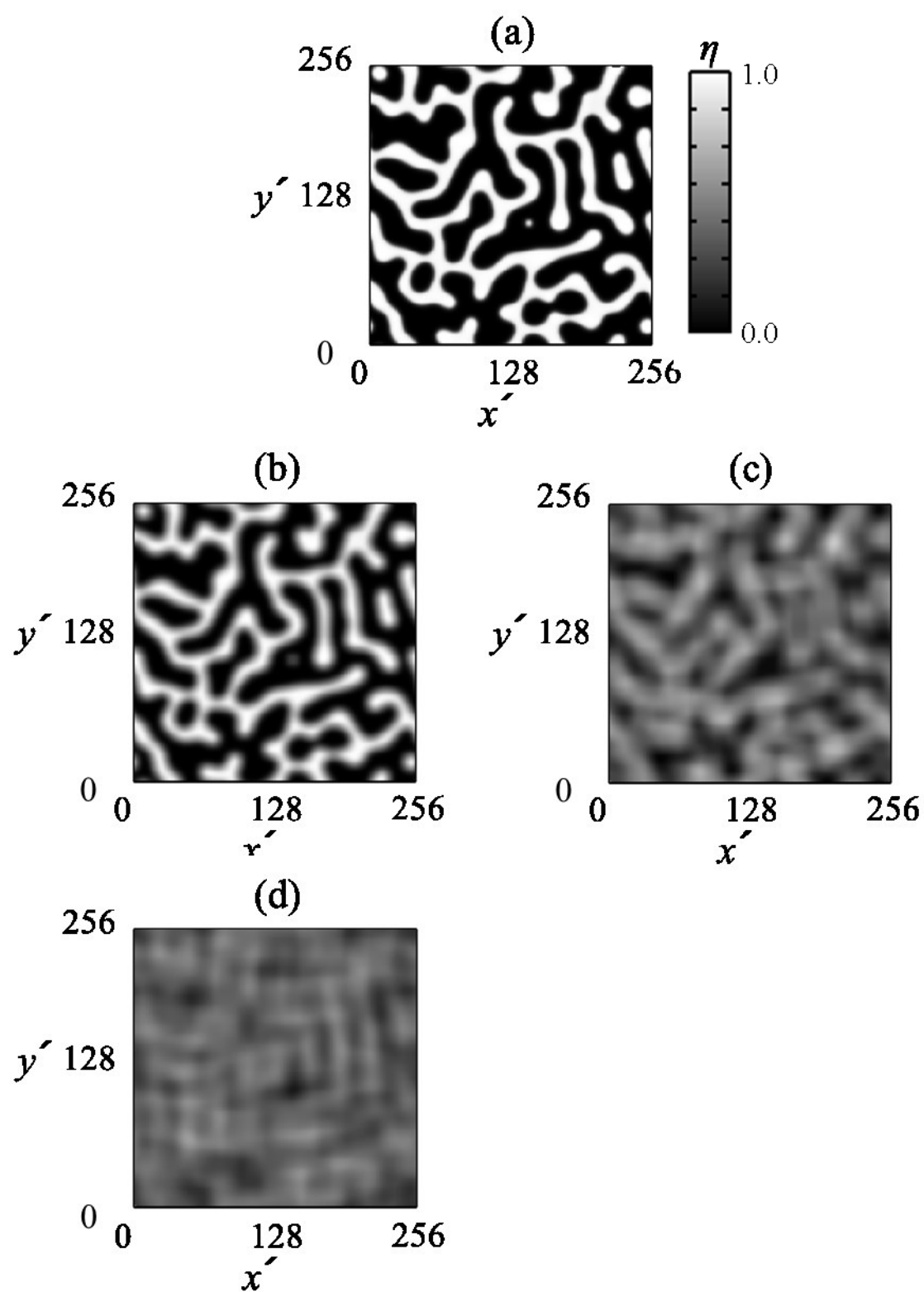


図 3.5 移動平均による組織③の LRO の空間分布の変化.

(a) $l = 1$ (b) $l = 11$ (c) $l = 27$ (d) $l = 41$

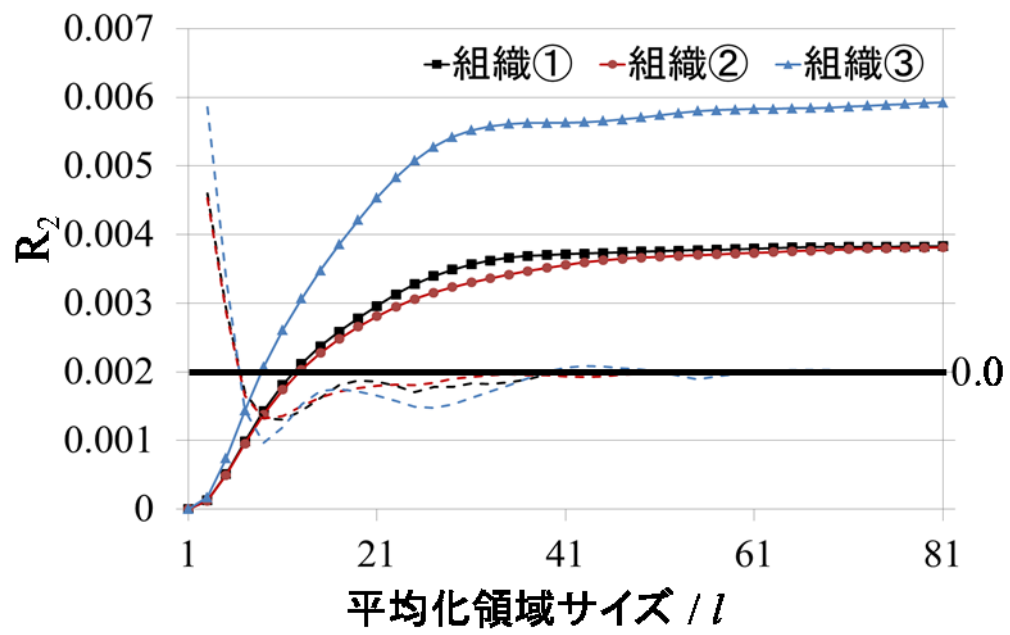


図 3.6 平均化領域サイズ l に対する R_2 の変化. (移動平均)

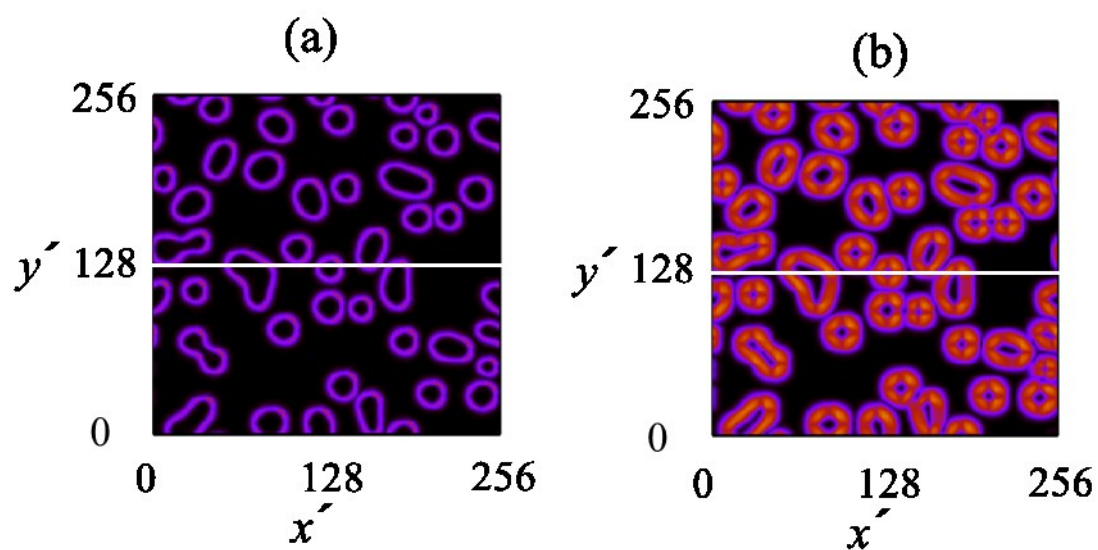


図 3.7 移動平均による組織①の LRO の空間勾配分布の変化.

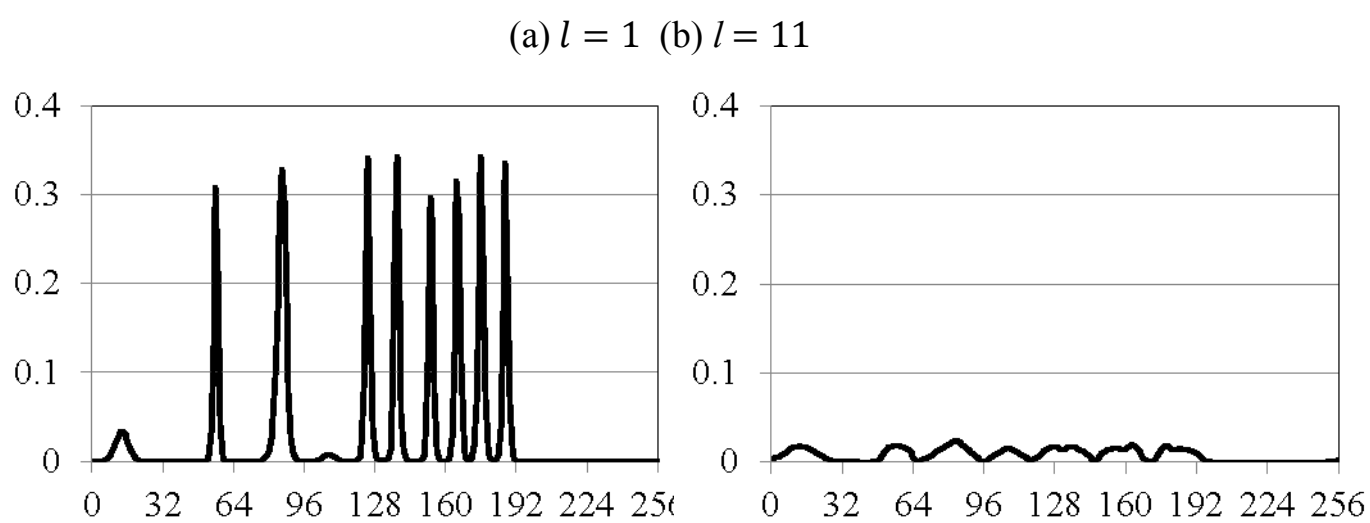


図 3.8 組織①の LRO の空間勾配分布プロファイル.

(a) $l = 1$ (b) $l = 11$

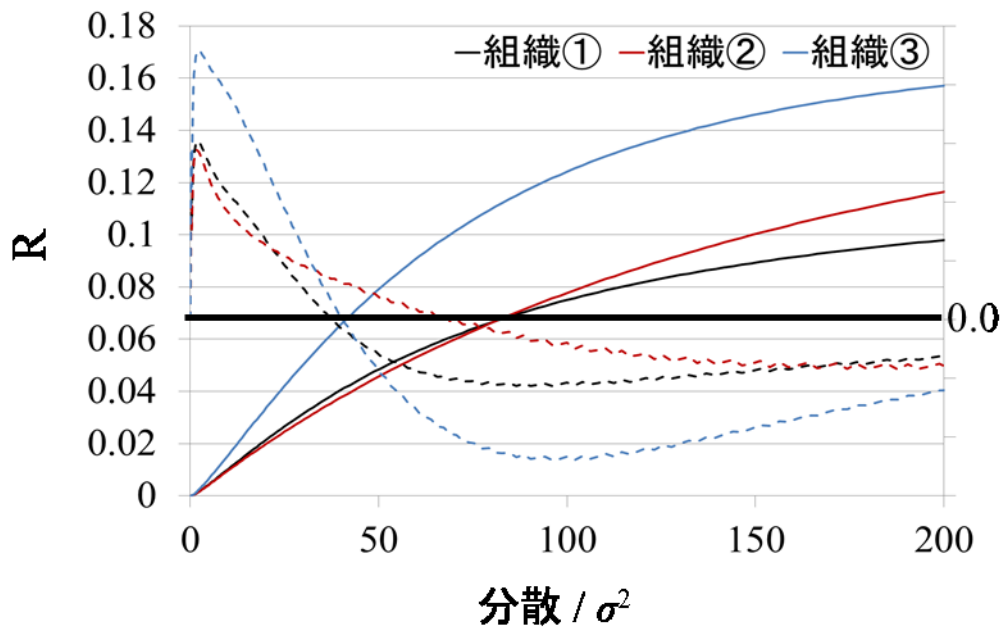


図 3.9 分散 σ^2 に対する R の変化. (ガウシアンフィルタ)

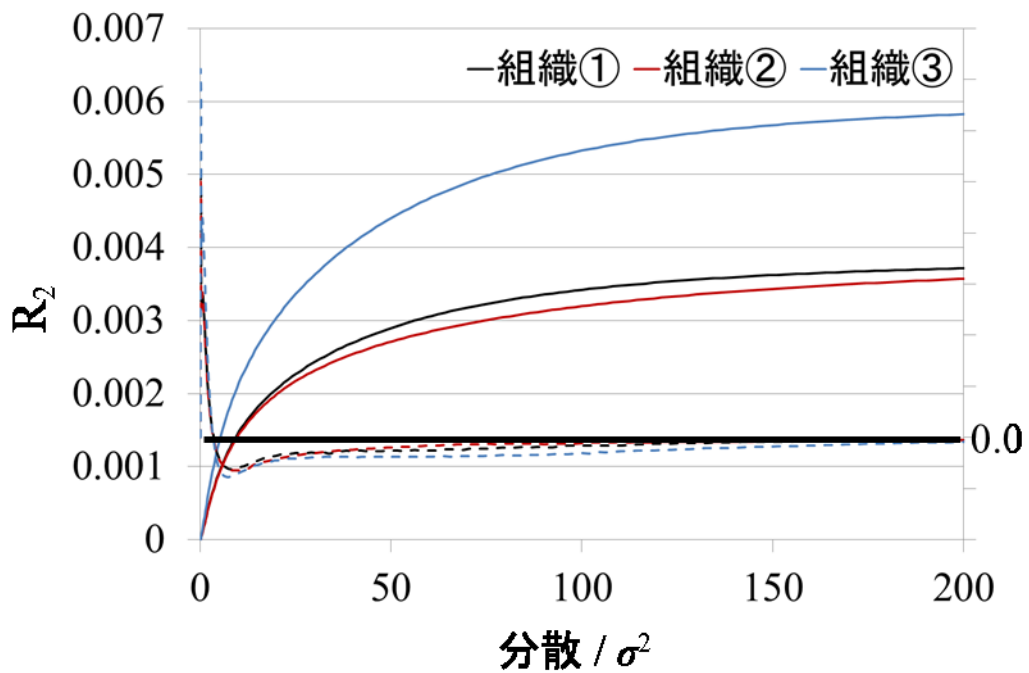


図 3.10 分散 σ^2 に対する R_2 の変化. (ガウシアンフィルタ)

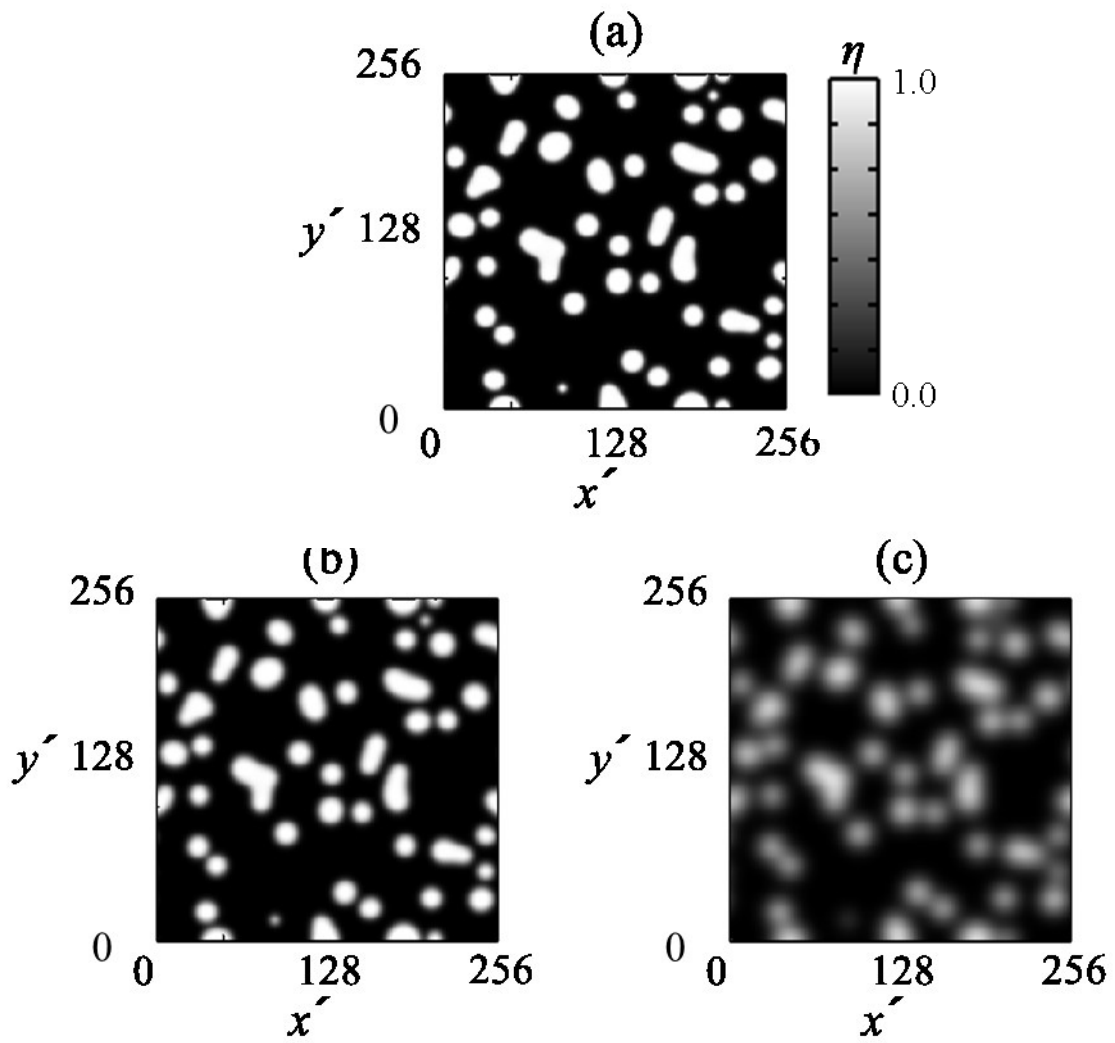


図 3.11 ガウシアンフィルタによる組織①の LRO の空間分布の変化.

(a) $\sigma^2 = 0.0$ (b) $\sigma^2 = 4.0$ (c) $\sigma^2 = 43.6$

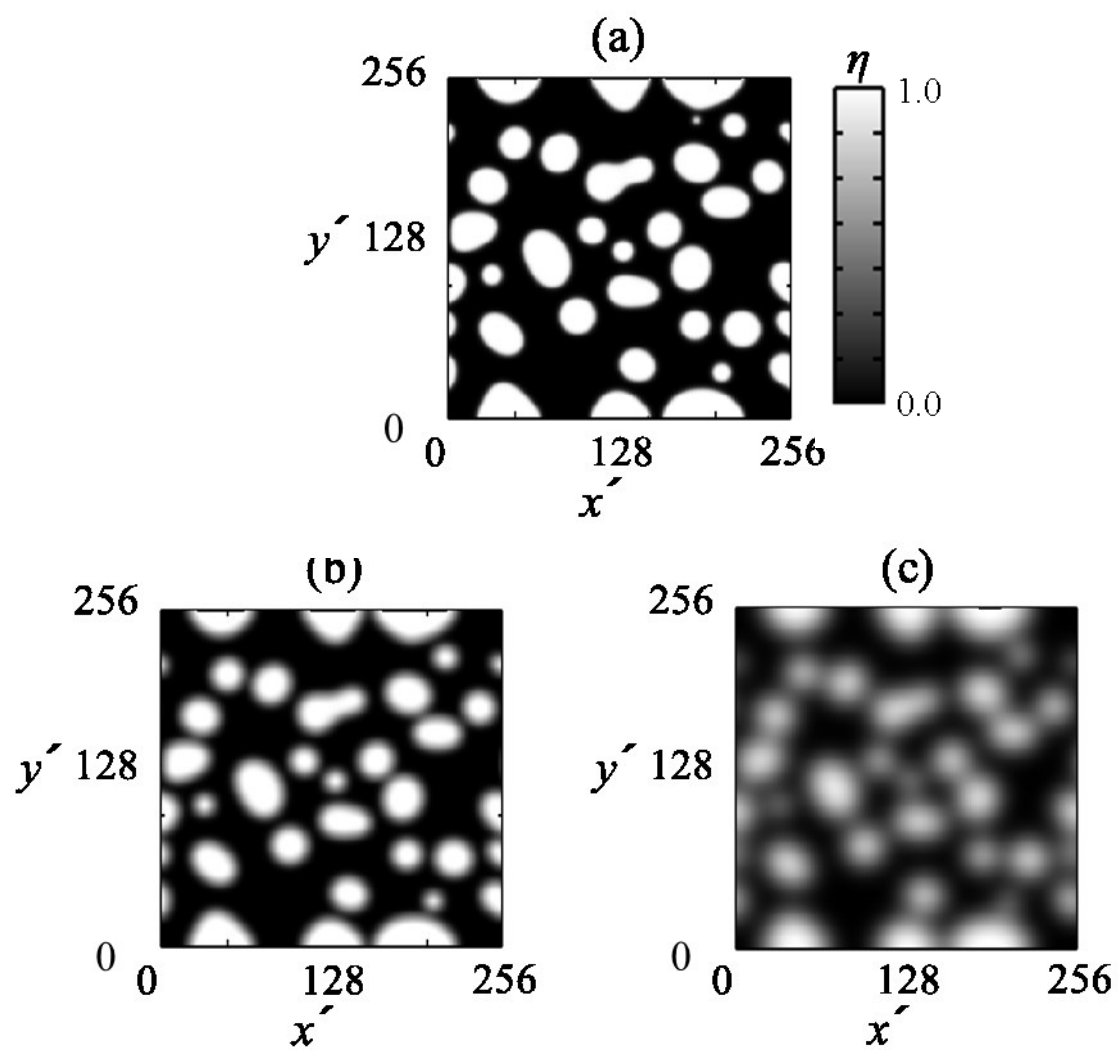


図 3.12 ガウシアンフィルタによる組織②の LRO の空間分布の変化.

(a) $\sigma^2 = 0.0$ (b) $\sigma^2 = 4.0$ (c) $\sigma^2 = 77.4$

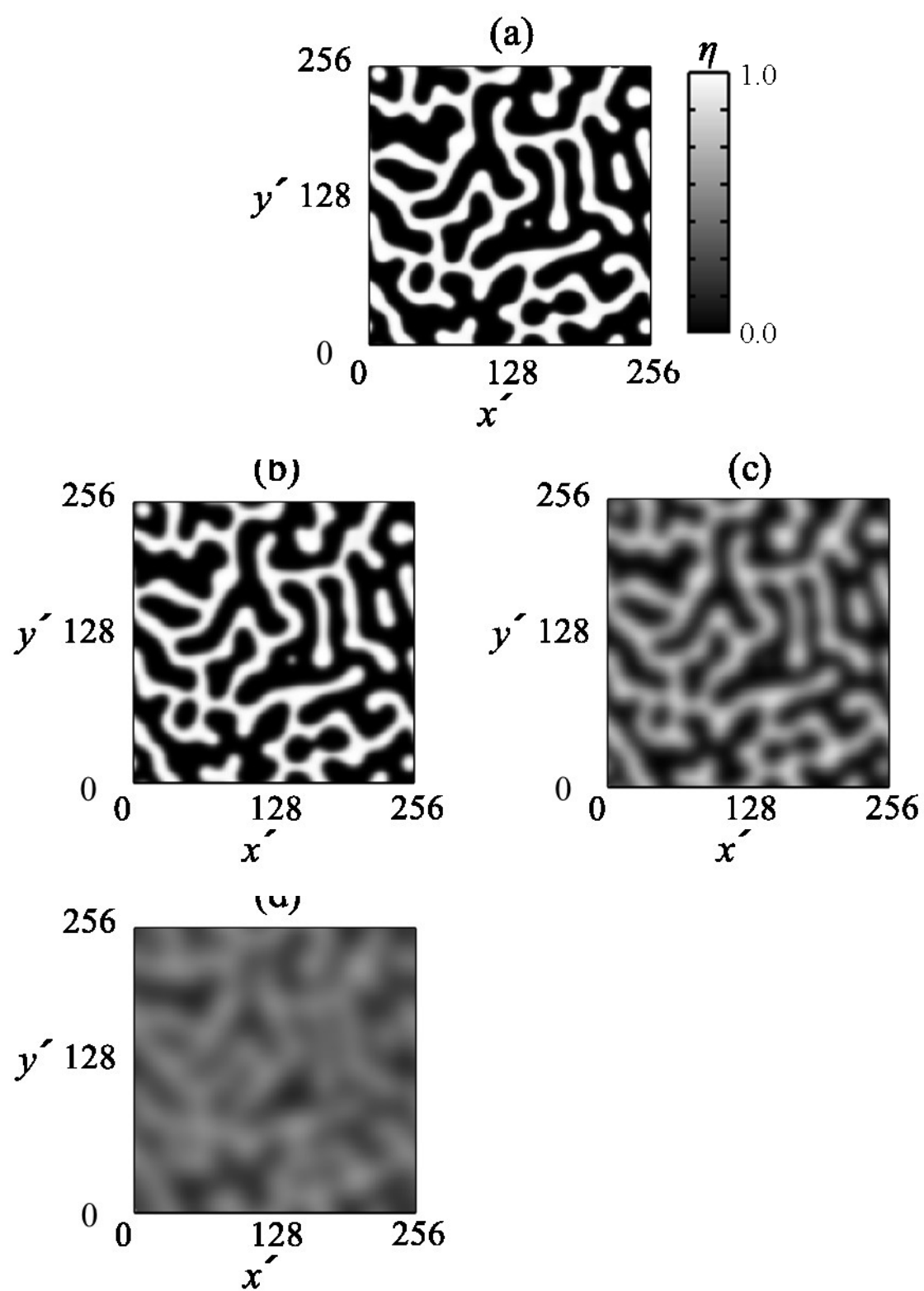


図 3.13 ガウシアンフィルタによる組織③の LRO の空間分布の変化.

(a) $\sigma^2 = 0.0$ (b) $\sigma^2 = 4.0$ (c) $\sigma^2 = 43.6$ (d) $\sigma^2 = 148.9$

4. スペクトル解析による組織の特徴の評価

前章では, Tanaka ら^{30,31)}により画像復元に用いられた変分原理に基づく統計力学的手法を応用した組織の特徴の変化の定量的評価方法について述べた. 本章では, スペクトル解析による組織の特徴の変化の定量的評価方法について述べる.

4.1 スペクトル解析

4.1.1 スペクトル解析の数学的基礎

この節ではスペクトル解析の数学的基礎⁵³⁾について概説する.

周期 $T = 2\pi$ の周期関数 $f(x)$ は以下のように三角関数により展開することができる.

$$f(x) \sim \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} (a_n \cos nx + b_n \sin nx) \quad (4.1)$$

$$a_n = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \cos nx \, dx \quad (4.2)$$

$$b_n = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \sin nx \, dx \quad (4.3)$$

式 (4.1) のような展開が可能なのは, 三角関数列 $\{\cos nx\}\{\sin nx\}$ が式 (4.4)~(4.6) の直交性, そして式(4.7) の Parseval の等式に示される完備性を満たすためであり, このとき三角関数列 $\{\cos nx\}\{\sin nx\}$ は Hilbert 空間において完全直交基底である.

$$\int_{-\pi}^{\pi} \cos mx \cos nx \, dx = \pi \delta_{mn} \quad (4.4)$$

$$\int_{-\pi}^{\pi} \sin mx \sin nx \, dx = \pi \delta_{mn} \quad (4.5)$$

$$\int_{-\pi}^{\pi} \cos mx \sin nx \, dx = 0 \quad (4.6)$$

$$\frac{a_0^2}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} (a_n^2 + b_n^2) = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} |f(x)|^2 dx \quad (4.7)$$

ただし, δ_{mn} はクロネッカー・デルタ $\delta_{mn} = 1 (m = n), 0 (m \neq n)$ である.

オイラーの公式

$$e^{i\theta} = \cos \theta + i \sin \theta \quad (4.8)$$

を用いて式 (4.1) を複素形式に直すと,

$$\begin{aligned} f(x) &\sim \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{(a_n - ib_n)}{2} e^{inx} + \frac{(a_n + ib_n)}{2} e^{-inx} \right) \\ &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{inx} \end{aligned} \quad (4.9)$$

$$c_n = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) e^{-inx} dx \quad (4.10)$$

式 (4.9), (4.10) を周期 $T = L$ の関数について一般化すると,

$$f(x) \sim \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{\frac{2\pi i n x}{L}} \quad (4.11)$$

$$c_n = \frac{1}{L} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} f(x) e^{-\frac{2\pi i n x}{L}} dx \quad (4.12)$$

式 (4.12) を式 (4.11) に代入し, $\omega_n = \frac{2n\pi}{L}$, $\Delta\omega = \omega_n - \omega_{n-1} = \frac{2\pi}{L}$ とおくと,

$$f(x) \sim \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left\{ \frac{1}{2\pi} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} f(x) e^{-i\omega_n x} dx \right\} e^{i\omega_n x} \Delta\omega \quad (4.13)$$

関数 $f(x)$ が非周期関数 ($L \rightarrow \infty$) のとき, $\Delta\omega \rightarrow d\omega$, $\omega_n \rightarrow \omega$ (ω :連続的な値をとる変数) と置き換えることができ, 以下のような式になる.

$$\begin{aligned} f(x) &\sim \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-i\omega x} dx \right] e^{i\omega x} d\omega \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} F(\omega) e^{i\omega x} d\omega \end{aligned} \quad (4.14)$$

$$F(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-i\omega x} dx \quad (4.15)$$

$F(\omega)$ を関数 $f(x)$ のフーリエ変換といい, その逆を逆フーリエ変換という.

離散化されたデータ $f(m)$ について, 以下の離散フーリエ変換⁵³⁾ が定義される.

$$f(m) = \sum_{k=0}^{M-1} F(k) e^{ikm} \quad (4.16)$$

$$F(k) = \sum_{k=0}^{M-1} f(m)e^{-ikm} \quad (4.17)$$

2次元フーリエ変換は以下のように定義される²⁰⁾.

$$f(x, y) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} F(u, v)e^{2\pi i(ux+vy)} du dv \quad (4.18)$$

$$F(u, v) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(x, y)e^{-2\pi i(ux+vy)} dx dy \quad (4.19)$$

また同様に、二次元における離散フーリエ変換は以下のように定義される.

$$f(m, n) = \sum_{m=0}^{M-1} \sum_{n=0}^{N-1} F(k, l)e^{2\pi i(km+ln)} \quad (4.20)$$

$$F(k, l) = \sum_{k=0}^{M-1} \sum_{l=0}^{N-1} f(m, n)e^{-2\pi i(km+ln)} \quad (4.21)$$

4.1.2 スペクトル解析による画像評価法

本節では組織の定量的な評価法としてスペクトル解析について以下に説明する. **LRO** の空間分布として表される組織画像 $\eta(x, y)$ に対してフーリエ変換を行うと,

$$H(u, v) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \eta(x, y) \exp\{-2\pi i(xu + yv)\} dx dy \quad (4.22)$$

ここで, u, v は周波数成分である. パワースペクトルは, 1.3.2 節で定義したものと同様に, 以下のようになる.

$$P(u, v) = |H(u, v)|^2 \quad (4.23)$$

組織画像は離散データとして与えられるため, 本章で記述されているフーリエ変換およびフーリエ逆変換はすべて二次元高速フーリエ変換(**2-D FFT**)を用いて行われている.

以下では, スペクトル解析によって, ガウシアンフィルタによる組織の特徴の変化を定量的に評価していく.

4.2 結果

図 4.1 (a)-(c) はフェーズフィールド法により計算して得られた時刻 $t' = 7.0$ のときの組織(組織①)と、それに対してガウシアンフィルタを行った後の組織を示した図であり、それぞれ (a) $\sigma^2 = 0.0$ (平均化前), (b) $\sigma^2 = 86.0$, (c) $\sigma^2 = 120.0$ のときの組織を示している. LRO の値は図 4.1(a)のグレースケールに示されている.

図 4.2 (a)-(c) はそれぞれ (a) $\sigma^2 = 0.0$, (b) $\sigma^2 = 86.0$, (c) $\sigma^2 = 120.0$ のとき式(4.23)によって与えられる各組織画像のパワースペクトルを示している. 各図の横軸 u および縦軸 v は波数 $k = 1/\lambda$ であり, λ は波長である. これらを見ると組織画像の短波長成分が平均化によりカットされているのが確認され, より大きな σ^2 の値のときほど顕著である. 図 4.3 (a)-(c) は u 軸に沿ったパワースペクトルのプロファイルを示しており, それぞれ図 4.2 (a)-(c)に対応している. 各パワースペクトルプロファイルに存在している短波長成分のピークが平均化によって失われているのが確認されるが, 図 4.3(a)のピーク I に着目すると, これは図 4.3(b)では失われていることがわかる. このピークの波長は図 4.1(a)の規則ドメイン間の平均間隔 28.1 に対応しており, 実際, 図 4.1(b) に示されるように組織画像がぼやけてしまうことによって規則ドメイン間の間隔が不明瞭になっている. 図 4.3(b)ではこのような特徴的なピークは失われているが, 最も高いピーク II は残ったままである. このピークは不規則相の周期性に対応していると考えられる. 図 4.4 はピーク II から逆フーリエ変換を行った結果得られた組織画像であるが, 暗い不規則相間の間隔はピーク II の波長 42.7 におおよそ一致していることがわかる. 図 4.3(c)では, さらに大きな平均化によってほとんど全ての規則ドメインが潰れることで元の組織画像の特徴的なピークが失われているのが確認できる. 以上のように, スペクトル解析によって平均化操作による組織画像の変化を定量的に評価することができた.

図 4.5 に, 組織①に対して $\sigma^2 = 43.6$ でガウシアンフィルタを行ったときの組織画像, つまり図 3.11(c)の組織画像から得られたパワースペクトルを示す. 図 4.6 は, 図 4.5 のパワースペクトルの u 軸に沿ったプロファイルである. これを見ると, 図 4.3(a)にあったピーク I が消えていることが確認される. よって, 図 3.9 の R の変化挙動は, 平均化操作によりピーク I が消え, 規則ドメイン間の間隔が不明瞭になるような組織画像の変化が起こったことに対応して変曲点を取っていたと考えられる. ただし, 図 3.9 からはピーク II に対応する変化は読み取れない. パラメーター R による評価では組織画像に含まれる, 異なる長さを持った特徴をそれぞれ分離して評価することは困難である.

4.3 結言

本章では、フェーズフィールド法の計算により得られた組織画像に対してガウシアンフィルタ操作を行い劣化組織画像を生成した。その後、スペクトル解析によって元組織画像および劣化組織画像を構成する相の分布の情報を得た。その結果、パワースペクトルの分布は平均規則ドメイン間隔等の組織の特徴的長さに関連しており、パワースペクトルのピークの消失に対応付けて組織の特徴の変化を示すことができた。以上のようにして、スペクトル解析により計算組織画像の再現性を定量的に評価することができた。この手法を一般化するためには他の様々な特徴の組織に対して評価を行う必要があるが、これは今後の研究課題として残されている。また、パワースペクトルのピークの消失が前章で述べたパラメーター R の変化挙動と対応することがわかった。

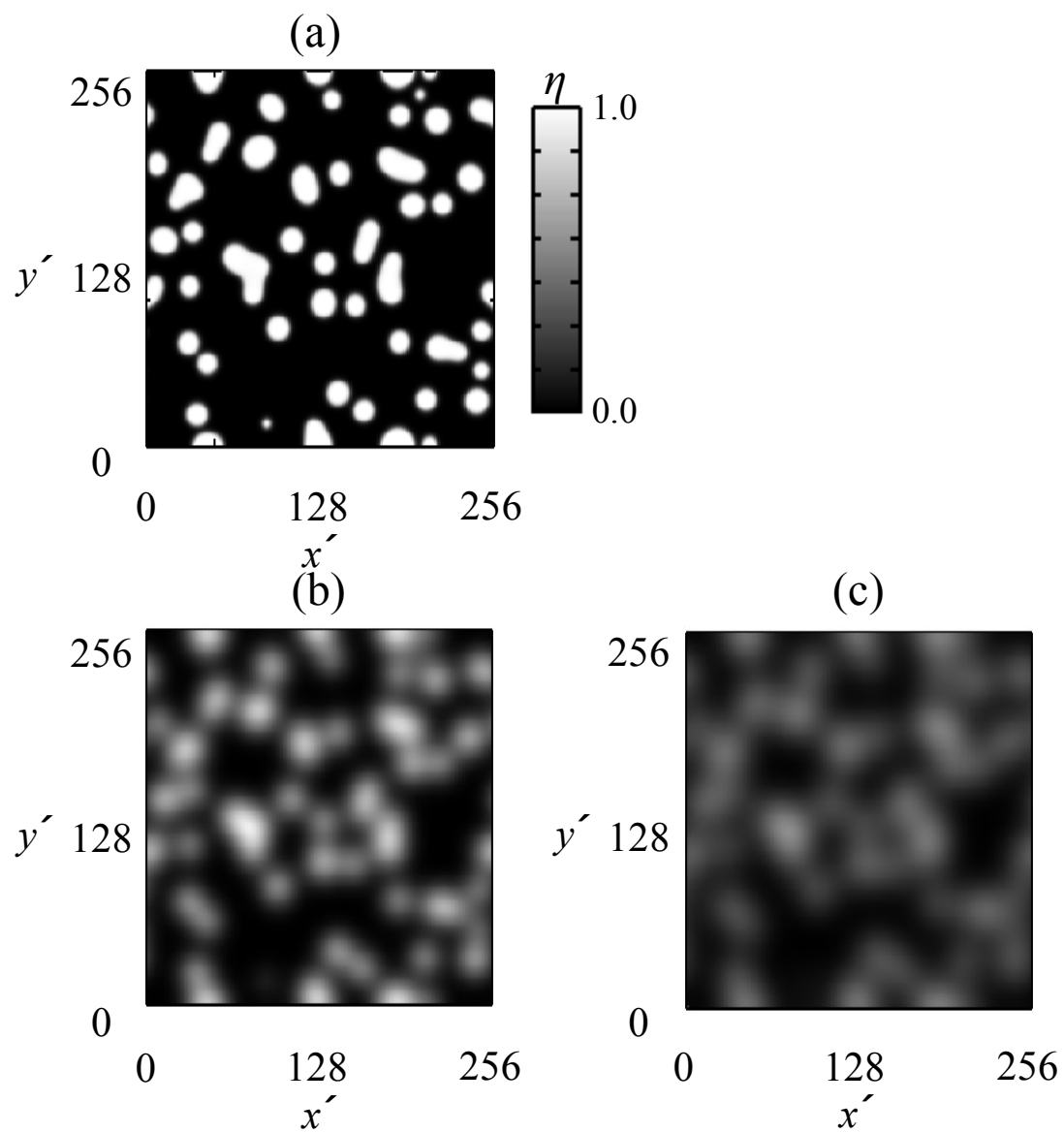


図 4.1 ガウシアンフィルタによる組織①の LRO の空間分布の変化.

(a) $\sigma^2 = 0.0$ (b) $\sigma^2 = 86.0$ (c) $\sigma^2 = 120.0$

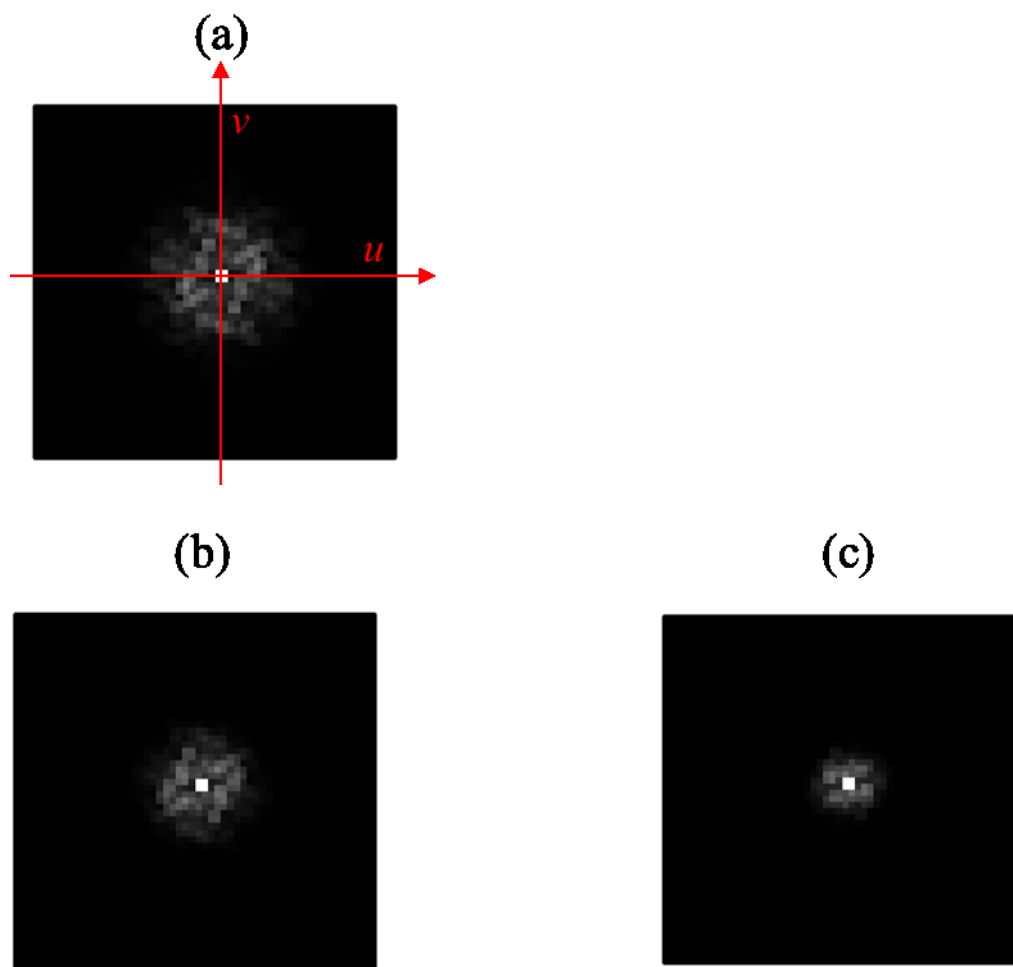


図 4.2 図 4.1(a)-(c)の組織のパワースペクトル.

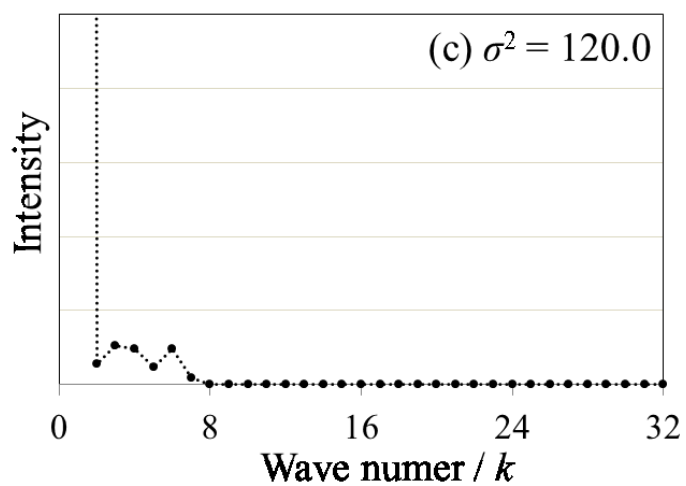
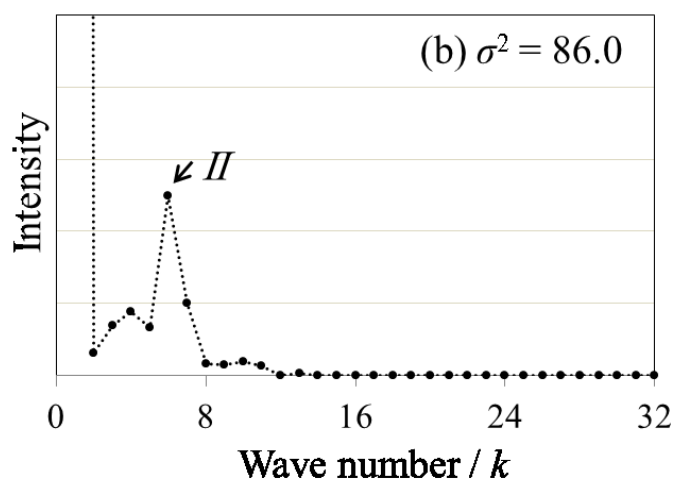
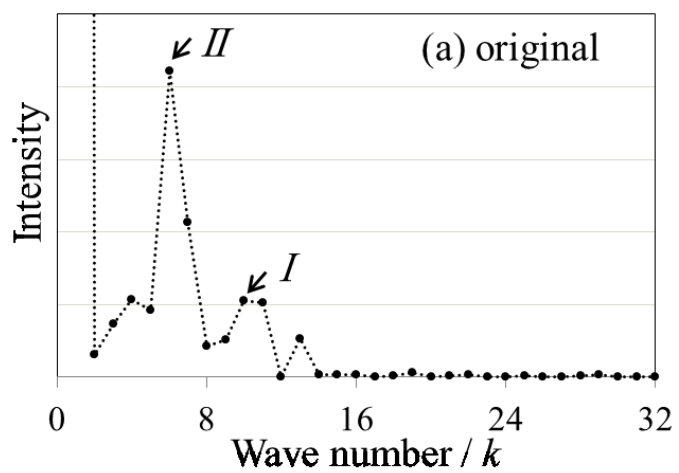


図 4.3 図 4.2(a)-(c)のパワースペクトルの一次元プロファイル.

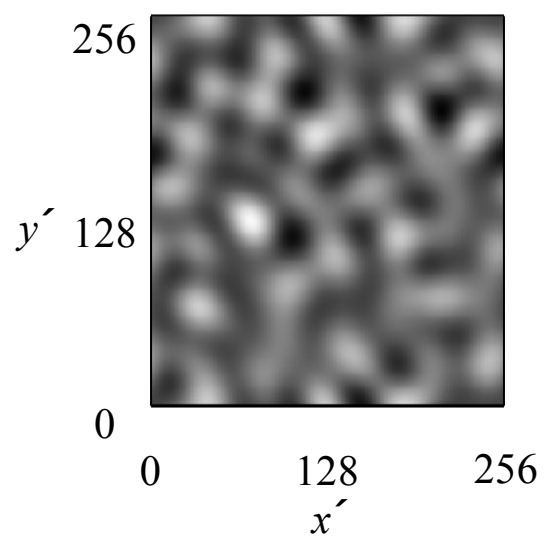


図 4.4 図 4.3(a)のピーク II の逆フーリエ変換から求めた組織画像

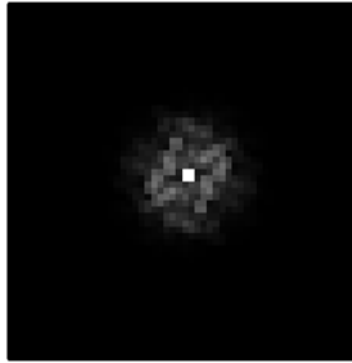


図 4.5 図 3.10(c)の組織のパワースペクトル.

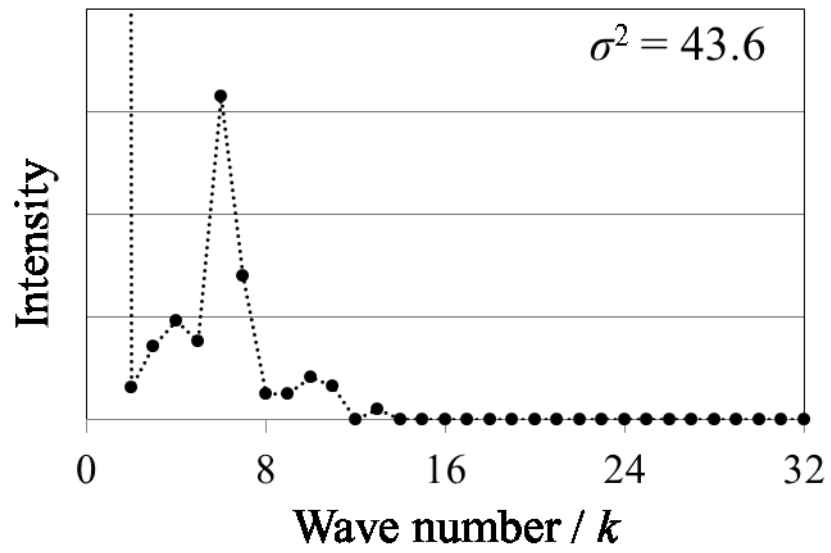


図 4.6 図 4.5 のパワースペクトルの一次元プロファイル.

5. 結論

フェーズフィールド法により，規則・不規則変態による規則ドメインの成長過程の計算を行った．得られた組織に対して移動平均あるいはガウシアンフィルタリング操作を行い，画像の再現度を評価するパラメーター R , R_2 の平均化領域サイズに対する変化挙動を調査した．また，スペクトル解析を用いて組織画像の特徴がガウシアンフィルタによりどの程度変化するかを評価した．その結果，以下の結論を得た．

1. フェーズフィールド法により計算した組織に対して移動平均を行ったときの平均化領域サイズ l ，あるいはガウシアンフィルタリング操作を行ったときの分散 σ^2 に対する R および R_2 の変化挙動は，平均化操作による規則ドメインの消失や結合といった組織の特徴の変化に対応したものとなる．従って平均化操作を行った際の R , R_2 の値は組織の粒径や粒の空間分布といった特徴に依存すると思われる．またガウシアンフィルタリング操作を行った際の R , R_2 の値は σ^2 に対して単調増加し，あるしきい値を超えると組織の特徴が失われることから，組織の特徴が失われない適切な σ^2 の値の目安を R , R_2 による評価から知ることができる．
2. 移動平均法には特定の周期性が強調されてしまう，メッシュ形状により等方的な平均化にならないといった問題点があり，組織画像を平滑化させてぼやかすという目的に対してはガウシアンフィルタの方が適切である．
3. スペクトル解析により平均化操作による組織の特徴の変化をパワースペクトルのピークの消失に対応付けて表すことができた．また，パワースペクトルのピークの消失はパラメーター R の変化挙動と対応していることが確認できた．さらに，スペクトル解析ではパワースペクトルの各ピークの成分を抽出して逆変換を行うことにより，組織画像に含まれる，それぞれ異なる長さを持った特徴を分離して解析することができた．

以上のことより，本研究で提案した Tanaka ら^{30,31)}により画像復元に用いられた変分原理に基づく統計力学的手法を応用した組織の特徴の変化の評価方法およびスペクトル解析による組織画像評価方法は，マルチスケール計算における粗視化を行う際に有効な評価方法となり得るものである．

本研究で評価の対象とした組織は比較的シンプルなものであったため，組織画像の視覚的な変化をパラメーター R , R_2 ，あるいはパワースペクトルの変化と容易に対応付けることができた．これらの評価方法を一般化するためには，デンドライト組織やラメラ組織といった，より複雑な特徴を有する組織画像に対して評価を行う必要があるが，それは今後の課題である．

参考文献

- [1] 大野 宗一: 離散格子及び連続体モデルの混成手法に基づく規則化過程のマルチスケール解析 博士論文 (北海道大学工学研究科) 2004
- [2] L. Q. Chen: *Annu. Rev. Mater. Res.*, **32**(2002), 113.
- [3] N. Provatas and K. Elder: *Phase-Field Methods in Materials Science and Engineering*, Wiley-VCH, Weinheim, 2010.
- [4] Ingo Steinbach: *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, **17**(2009), 073001.
- [5] Ryo Kobayashi: *Physica D*, **63**(1993), 410.
- [6] J. A. Warren and W. J. Boettinger: *Acta metall. Mater.*, **43**(1995), 689.
- [7] H. Ramanarayan, T.A. Abinandanan: *Acta Mater.* **51**(2003), 4761.
- [8] S. Y. HU and L. Q. CHEN: *Acta mater.*, **49**(2001), 1879.
- [9] T. M. Rogers, K. R. Elder, and Rashmi C. Desai: *Phys. Rev. B*, **37**(1988), 9638.
- [10] H. Nishimori and A. Onuki: *Phys. Rev. B*, **42**(1990), 980.
- [11] Laurent Proville and Alphonse Finel: *phys. rev. B*, **64**(2001), 05104.
- [12] Y. WANG, D. BANERJEE, C. C. SU and A. G. KHACHATURYAN: *Acta Mater*, **46**(1998), 2983.
- [13] T. Ichitsubo, K. Tanaka, M. Koiwa, and Y. Yamazaki: *Phys. Rev. Lett.*, **23**(2001), 1165.
- [14] T. Kitashima, H. Harada: *Acta Mater.*, **57**(2009), 2020.
- [15] J.C. Wang, M. Osawa, T. Yokokawa, H. Harada, M. Enomoto: *Computational Materials Science* **39**(2007), 871.
- [16] Bradley S. Fromm, Kunok Chang, David L. McDowell, Long-Qing Chen: *Acta mater.*, **60**(2012), 5984.
- [17] A. Yamanaka, T. Takaki and Y. Tomita: *Mat. Sci. Eng.*, **A 480**(2008), 244.
- [18] Alastair Bruce and David Wallace, “Critical point phenomena: universal physics at large length scales” in *The New Physics*, Paul Davies, eds., Cambridge University Press, Cambridge (1989), 236-267.
- [19] 川村 光: 統計物理, 丸善(1997)
- [20] 田村 秀行 : コンピュータ画像処理入門, オーム社(1985)
- [21] H. Ishii, K. Ohkubo, S. Miura, T. Mohri: *Mater. Trans.* **44**(2003), 1679.

- [22] G. E. Fuchs: Materials Science and Engineering **A300**(2001), 52.
- [23] 須藤 一, 田村 今男, 西澤 泰二: 金属組織学, 丸善(1972)
- [24] 辛島 誠一: 金属・合金の強度, 日本金属学会(1972)
- [25] T. Mohri, M. Ohno, and Y. Chen: J. Phase Equilib. Diffus., **27**(2006), 47.
- [26] R. Kikuchi: Phys. Rev. **81**(1951), 988.
- [27] 菊池 良一, 毛利 哲雄: クラスター変分法, 森北出版(1997)
- [28] 毛利 哲雄: 材料システム学, 朝倉書店(2002)
- [29] Tohru Morita, “Formal Structure of the Cluster Variation Method”, Prog. Theor. Phys, Suppl. **115**(1994), 27.
- [30] K. Tanaka, T. Morita: Physics Letters **A203**(1995), 122.
- [31] K. Tanaka, T. Morita: “Application of the Cluster Variation Method to the Image Restoration Problem”, in Theory and Applications of the Cluster Variation and Path Probability Methods, J.L. Moran-Lopez and J.M. Sanchez, eds., Plenum Press, New York, (1996), 353-373.
- [32] 早稻田 嘉夫, 松原 英一郎: X線構造解析, 内田老鶴圃(1998)
- [33] M. Ohnuma, J. Suzuki, S. Ohtsuka, S.-W. Kim, T. Kaito, M. Inoue, H. Kitazawa: Acta Mater. **57**(2009), 5571.
- [34] J. Ohser and F. Mucklich: "Statistical Analysis of Microstructures in Materials Science", Wiley, (2000).
- [35] Hao Yao, Tian Jifeng and Wang Zhongguang: Materials Science and Engineering, **A148**(1991), 45.
- [36] Gottfried Laschet, Tatyana Kashko, Stefanie Angel, Josef Scheele, Reimo Nickel, Wolfgang Bleck, Kirsten Bobzin: Materials Science and Engineering A **472**(2008), 214.
- [37] J. W. Cahn and J. E. Hilliard : J. Chem. Phys., **28**(1958), 258.
- [38] S. M. Allen and J. W. Cahn : Acta metal., **27**(1979), 1085.
- [39] Y. Wan, A. G. Khachatryan : Acta metal. mater., **43**(1995)
- [40] Richard A. Swalin : 固体の熱力学、コロナ社(1965)
- [41] H. Sagane, K. Oki and T. Eguchi : Trans. JIM, **18**(1977), 488.
- [42] S. M. Allen and J. W. Cahn : Acta Metall., **23**(1975), 1017.
- [43] M. Bouchard and G. Thomas : Acta Metall., **23**(1975), 1485.

- [44] H. Kubo, I. Cornelis and C. M. Wayman : Acta Metall., **28**(1980), 405.
- [45] H. Hasaka : Trans. JIM, **21**(1980), 660.
- [46] 渡辺 澄夫: ベイズ統計の理論と方法, コロナ社(2012)
- [47] 戸田 盛和: 熱・統計力学, 岩波書店(1983)
- [48] W. L. Bragg and E. J. Williams: Proc. Roy. Soc., **A145**(1934), 699.
- [49] W. L. Bragg and E. J. Williams: Proc. Roy. Soc., **A151**(1935), 540.
- [50] H. Bethe: Proc. Roy. Soc., **A150**(1935), 522.
- [51] S. Kirkpatrick, C. D. Gelatt, Jr., M. P. Vecchi: Science, **220**(1983), 671.
- [52] Mark S. Nixon and Alberto S. Aguado: Feature Extraction and Image Processing, Academic Press (2008).
- [53] 壁谷善継 : フーリエ解析と偏微分方程式入門, 共立出版(2010)
- [54] E. Oran Bringham: 高速フーリエ変換, 科学技術出版社(1979)

謝辞

本研究を遂行するにあたり，多くの方々の御協力を得られ，お世話になりましたことを深く御礼申し上げます．

指導教官である三浦誠司教授には，貴重なお時間を割いて有益なディスカッションをして頂き，また研究者としても人間としても未熟な自分を見捨てずに面倒を見て頂いたことに，感謝の意を表します．

毛利哲雄教授には，本研究を含めあらゆる面でお世話になりました．大いにご迷惑をお掛けしたことと存じますが，毛利先生にご指導ご鞭撻を賜れたことは，私のこれからの人生におきまして大きな自信と誇りになると信じています．

滝沢聡助教には，セミナーの際に非常にたくさんの重要なアドバイスを頂き，またコンピューターなど機器の管理でお世話になりましたことに，感謝の意を表します．

卒業された諸先輩方をはじめ，研究室の仲間や秘書の岩田洋子さんにも多くの助力をいただきました．皆様方に，感謝の意を表します．

最後に，これまで私の生活を支えてくれた両親に，心よりの感謝を申し上げます．