
Objektive und reproduzierbare
Gefügeklassifizierung niedriglegierter
Stähle



Dissertation

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

von
Jessica Gola

Saarbrücken
2019

Tag des Kolloquiums: 09. Januar 2020

Dekan: Prof. Dr. Guido Kickelbick

Berichterstatter: Prof. Dr.-Ing. F. Mücklich
Prof. Dr. mont. C. Motz

Vorsitz: Prof. Dr. G. Kickelbick

Akad. Mitarbeiter: Dr.-Ing. W. Ripplinger

„Träume dir dein Leben schön und
mach aus diesen Träumen deine Realität.“

- *Marie Curie* -

Zusammenfassung

Ziel der vorliegenden Arbeit ist die Entwicklung einer objektiven und reproduzierbaren Gefügeklassifizierung niedriglegierter Stähle. Hierfür wird mit den in der Informatik zur Verfügung stehenden Methoden des maschinellen Lernens ein Arbeitsablauf für eine Klassifizierung der drei Gefügebestandteile Perlit, Bainit und Martensit erarbeitet.

Als Grundlage für das Klassifizierungsmodell wird das Stützvektorverfahren (Support Vector Machine, SVM) genutzt, welches auf einen Merkmalsdatensatz der drei Klassen angewendet wurde. Für den Aufbau der Datenbank werden verschiedene Gefügemerkmale aus korrelativen Licht- und Elektronenmikroskopaufnahmen verwendet. Die Merkmalsdatenbank beinhaltet form- und größenbeschreibende Parameter sowie pixelbasierte Merkmale, die aus der Bildtextur der Mikroskopaufnahmen extrahiert werden.

Der Einfluss der Datenvorverarbeitung und -aufteilung auf die Klassifizierungsergebnisse werden untersucht. Neben dem Aufbau eines validen Klassifizierungsprozesses liegt der Fokus auf der Weiterentwicklung und Identifizierung der für die Klassifizierung entscheidenden, signifikanten Gefügemerkmale.

Für die aufgebaute Datenbasis können Klassifizierungsgenauigkeiten von bis zu 97 % für die vordefinierten Klassen erreicht werden.

Die Methodik des vorgestellten Ansatzes der Gefügeklassifizierung kann im Bereich der Stahlwerkstoffe erweitert und auf andere Werkstoffklassen übertragen werden.

Abstract

The aim of this thesis is to develop an objective and reproducible microstructure classification of low-alloy steels. For this purpose, a workflow for the classification of the three microstructural constituents pearlite, bainite and martensite is established using the methods of machine learning available in computer science.

The classification model is based on the support vector machine (SVM), which has been applied to a feature dataset of these three classes. To build up the database, various microstructural features extracted from correlative light and electron microscope images are used. The feature database contains shape and size describing parameters as well as pixel-based features, which are extracted from the image texture of the microscope images.

The influence of data pre-processing and data splitting on classification results is investigated. In addition to the design of a valid classification process, the focus is on the development and identification of the significant microstructural features which are relevant for the classification.

It is possible to achieve classification accuracies of up to 97 % for the predefined classes using the generated database.

The methodology of the approach presented can be extended in the field of steel materials and be transferred to other material classes.

Inhaltsverzeichnis

Danksagung.....	vii
Abkürzungsverzeichnis.....	viii
1 Motivation.....	1
2 Stand der Technik.....	3
2.1 Die verschiedenen Phasen und Gefügebestandteile in Stahl.....	3
2.1.1 Perlit.....	7
2.1.2 Martensit.....	8
2.1.3 Bainit.....	10
2.2 Gefügeanalyse.....	14
2.2.1 Gefügekontrastierung.....	14
2.2.2 Korrelative Analysemethoden.....	17
2.2.3 Quantitative Gefügeanalyse.....	20
2.3 Traditionelle Klassifizierung von Stählen.....	26
2.3.1 Gefügebasierte Klassifizierung von Stählen.....	28
2.3.2 Spezielle Systeme für bainitische und ferritische Strukturen.....	36
2.4 Klassifizierung durch maschinelles Lernen.....	43
2.4.1 Grundlagen der Klassifizierung durch maschinelles Lernen.....	44
2.4.2 Methoden des maschinellen Lernens.....	47
2.4.3 Anwendung in der Klassifizierung von Werkstoffgefügen.....	51
2.5 Stützvektorverfahren (Support Vector Machine / SVM).....	58
2.5.1 Grundlagen der Modellbildung.....	58
2.5.2 Datenvorverarbeitung und Merkmalsauswahl.....	64
2.5.3 Validierung der Ergebnisse (Konfusionsmatrix).....	65

3	Präzisierte Aufgabenstellung	68
4	Überblick über den Inhalt und die Verknüpfung der enthaltenen Publikationen	69
4.1	Data Mining Prozess und Datenaufteilung.....	70
4.2	Datenvorverarbeitung.....	72
4.3	Auswertung der SVM-Modelle.....	73
4.4	Methoden zur Merkmalsauswahl	74
4.5	Signifikanz der Merkmale.....	76
4.5.1	Morphologische Parameter	76
4.5.2	Morphologische Substrukturparameter	77
4.5.3	Pixelbasierte Parameter	78
4.5.4	Kombination der Merkmalsgruppen	80
4.6	Zusammenfassung und Ausblick	82
5	Enthaltene Publikationen	86
5.1	Überblick über die Kerninhalte	86
5.2	Publikation I.....	87
5.3	Publikation II.....	88
5.4	Publikation III	89
6	Fazit.....	90
7	Nicht enthaltene Publikationen	91
8	Literaturverzeichnis	I
	Abbildungsverzeichnis.....	XIV
	Tabellenverzeichnis	XVII

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich von Herzen allen Menschen aus meinem beruflichen und privaten Umfeld, die mich in der Zeit meiner Dissertation in vielfältiger Weise begleitet haben, meinen Dank aussprechen. Ohne eure Unterstützung wäre dies alles nicht möglich gewesen.

Im Besonderen möchte ich mich sehr herzlich bei meinem Doktorvater Prof. Dr. Frank Mücklich für die Möglichkeit an seinem Institut zu arbeiten und für seine immerwährende Unterstützung in fachlichen und persönlichen Themen bedanken. Vor allem möchte ich mich für sein Vertrauen in mich und meine Fähigkeiten bedanken, welches er mir als Quereinsteiger am Lehrstuhl jederzeit entgegengebracht hat. Besonders zu schätzen weiß ich seine vielseitige Förderung meiner persönlichen Entwicklung. Ich bin stolz ein Teil des Lehrstuhls zu sein und dankbar für die Erfahrungen, die ich sammeln konnte.

Weiterhin möchte ich mich bei meinem wissenschaftlichen Begleiter Prof. Dr. Christian Motz für die Begutachtung meiner jährlichen Fortschrittsberichte, seine Hilfe bei der Betreuung von Abschlussarbeiten und im Besonderen für die Unterstützung als Zweitkorrektor bedanken.

Für die inhaltliche Ausrichtung, die thematische Eingrenzung, die fachlichen Hinweise, die intensiven Diskussionen und die konstruktive Zusammenarbeit möchte ich meinem Betreuer am Lehrstuhl Dr. Dominik Britz danken. Ohne sein fachliches Feedback und seine fundierten Vorarbeiten zu meinem Thema wäre die Arbeit in dieser Form nicht möglich gewesen.

Meinen Kollegen der F&E bei Dillinger unter der Leitung von Volker Schwinn danke ich für die jederzeit vertrauensvolle Zusammenarbeit und ihre umfangreiche Hilfe. Ein besonderer Dank geht an meine Betreuer Dr. Thorsten Staudt und Dr. Andreas Schneider sowie an Dr. Marc Winter für ihre Zeit, die facettenreiche Unterstützung und die hilfreichen Diskussionen und Ratschläge in den verschiedensten Bereichen.

Ebenfalls möchte ich mich bei Prof. Dr. Klaus Berberich von der HTW Saar für die fachliche Unterstützung bei den interdisziplinären Themen meiner Arbeit bedanken.

Danken möchte ich außerdem allen Kollegen und Freunden am Lehrstuhl und an der Universität, vor allem aber den Kollegen der Stahlgruppe, meiner Kafferrunde und meinem Büro. Danke für die fachlichen und persönlichen Gespräche, das tolle und harmonische Arbeitsumfeld, die großartigen Erlebnisse und den Spaß. Für die sehr vielfältig erfahrene Hilfe möchte ich mich sehr herzlich bei allen bedanken. Im Besonderen möchte ich mich an dieser Stelle noch bei Johannes, Michael, Christoph und Leander für die unzähligen fachlichen Diskussionen und ihre wertvollen Tipps bedanken.

Ein ganz besonderer Dank gilt meiner Familie, vor allem meinen Eltern Monika und Wolfgang und meinem Mann Nils. Danke für eure Liebe, euren Rückhalt und dafür, dass ihr mir Mut gebt und immer auf mich achtet.

Abkürzungsverzeichnis

AISI	American Iron and Steel Institute	RF	Random Forest
ASTM	American Society for Testing and Materials	SAE	Society of Automotive Engineers
C	Kohlenstoff	SVM	Support Vector Machine
CNN	Convolutional Neural Network	TEM	Transmissionselektronen- mikroskop
DT	Decision Tree	UNS	Unified Numbering System
EBSD	Elektronenrückstreuung	VDEh	Verein Deutscher Eisenhüttenleute
ETD	Everhart-Thornley-Detektor	ZTU	Zeit-Temperatur- Umwandlungsdiagramm
EU	Europäische Union	XRD	Röntgenbeugung
FCNN	Fully Convolutional Neural Network		
Fe ₃ C	Zementit		
KG	Korngrenze		
GLCM	Gray-Level Co-Occurrence Matrix		
IIW	International Institute of Welding		
ISIJ	Japanese Iron and Steel Institute		
IQ	Image Quality		
KAM	Kernel Average Misorientation		
KG	Korngrenze		
kNN	k nächste Nachbarn		
kfz	kubisch flächenzentriert		
krz	kubisch raumzentriert		
LBP	Local Binary Pattern		
LIMI	Lichtmikroskop		
MA	Martensit/Austenit		
RBF	Radial Basis Function		
REM	Rasterelektronenmikroskop		

1 Motivation

Der Werkstoff Stahl hat durch seine Vielfältigkeit bezüglich der Werkstoffeigenschaften ein großes Anwendungsspektrum. Neben der Weiterentwicklung der bekannten Stahlsorten werden neue Stähle entwickelt, um sie noch gezielter auf bestimmte Anwendungen anzupassen. Die Eigenschaften der Stähle werden durch ihre chemische Zusammensetzung, unterschiedliche Prozessrouten und Wärmebehandlungen beeinflusst. Die möglichen Variationen der Prozessparameter bieten ein enormes Potential für Innovationen im Bereich der Stahlwerkstoffe. Traditionell werden neue Stähle durch die Veränderung der Prozessparameter aus dem Erfahrungsschatz der etablierten Stahlsorten hergestellt. Ob ein Material für eine bestimmte Anwendung geeignet ist, wird durch dessen Eigenschaften bestimmt. Diese können mit einer Reihe von mechanischen Prüfungen, z.B. Härte-, Zug-, Druck- und Ermüdungsprüfungen, sowie chemischen und physikalischen Analysen gemessen werden.

Eine Beurteilung gezielt neu entwickelter Stähle auf Basis der Prozess-Eigenschaftskorrelation ist jedoch aufgrund der Vielzahl an notwendigen iterativen Werksversuchen im industriellen Maßstab kosten- und zeitintensiv, sodass seit einigen Jahren der Trend zur gefügebasierten Werkstoffentwicklung geht. Neben dem direkten Nachweis von Werkstoffeigenschaften durch mechanische oder physikalische Prüfungen können die Eigenschaften von Materialien durch die Charakterisierung der Gefüge vorhergesagt werden. Durch ein besseres Verständnis der Gefüge besteht die Möglichkeit, den Herstellungsprozess präziser zu steuern und somit die Eigenschaften von Stahl noch gezielter einzustellen. Das Gefüge, welches das 3D-Erscheinungsbild des Werkstoffes definiert, ist das Bindeglied zwischen dem Herstellungsprozess und den Eigenschaften eines Werkstoffes [1]. Alle bei der Herstellung durchlaufenen Prozessschritte haben einen Einfluss auf die Entstehung verschiedener Gefügebestandteile und deren Anteil im Gesamtgefüge. Aus diesem Grund kann das Gefüge als Multiskalenspeicher des hergestellten Werkstoffes verstanden werden. Durch unterschiedliche Messmethoden besteht die Möglichkeit, sowohl in 2D als auch in 3D die Gefügebestandteile von der atomaren bis zur makroskopischen Skala zu untersuchen und die Verteilung der chemischen Zusammensetzung, kristallographische Charakteristika sowie Anteil, Verteilung und Kombination von Gefügebestandteilen zu analysieren [2].

Eine der größten Herausforderungen zur Erschließung des Potentials der gefügebasierten Werkstoffentwicklung ist die Gefügeklassifizierung.

Die Klassifizierung von Stahlgefügen erfolgt traditionell durch eine Beurteilung von mikroskopischen Aufnahmen. Dazu wird das Gefüge visuell begutachtet und verschiedene Bestandteile nach Erfahrungswissen anhand von Vergleichsbildern klassifiziert. Diese Beurteilung wird traditionell von Experten durchgeführt und enthält damit eine hohe subjektive Komponente. Schwierigkeiten ergeben sich vor allem bei den immer komplexeren Gefügen moderner Mehrphasenstähle mit mehreren Arten von Gefügebestandteilen und deren kleiner werdenden Strukturen. Dies führt dazu, dass die Ergebnisse der subjektiven visuellen Analysen oftmals nicht reproduzierbar sind, wie bereits eine Vielzahl von Ringversuchen, in welchen dieselbe Probe von verschiedenen Experten unterschiedlich beurteilt wird, verdeutlicht. Daraus ergeben sich vor allem Probleme in der Qualitätskontrolle und in der Entwicklung von Stahlsorten. Besondere Schwierigkeiten entstehen bei der Klassifizierung, wenn lediglich eine Mikroskopaufnahme verfügbar ist und keine zusätzlichen Informationen über den Herstellungsprozess, die Chemie und die Eigenschaften vorliegen. Zudem existiert bisher weder ein einheitliches Bewertungssystem noch eine einheitliche Nomenklatur für die Gefügeklassifizierung von Stählen. Dies führt dazu, dass derselbe Bestandteil mit unterschiedlichen Bezeichnungen benannt werden kann und somit eine eindeutige Zuordnung erschwert wird. Um die Korrelation der Gefüge zu Herstellungsprozessen und Eigenschaften zu ermitteln und eine gefügebasierte Werkstoffentwicklung realisieren zu können, muss das Gefüge verlässlich, objektiv und reproduzierbar charakterisiert und klassifiziert werden.

Die Entwicklung valider Methoden, die eine objektive und reproduzierbare Gefügeklassifizierung unabhängig vom Anwender ermöglichen, ist daher essentiell und von größter Relevanz für die gefügebasierte Werkstoffentwicklung. Das Problem der traditionellen Klassifizierung ist die Subjektivität der Ergebnisse. Aus diesem Grund ist es notwendig, neue Wege im Bereich der Gefügeklassifizierung zu erschließen. Die Informatik bietet mit den Methoden des maschinellen Lernens eine große Bandbreite an Algorithmen, die neue interdisziplinäre Lösungswege ermöglichen. Die vorliegende Arbeit soll durch die Nutzung dieser Methoden einen Beitrag zu einer objektiven und reproduzierbaren Gefügeklassifizierung niedriglegierter Stähle leisten. Der Ansatz nutzt hierfür gefügebasierte Merkmale aus korrelativen Mikroskopaufnahmen.

2 Stand der Technik

Stahl ist ein Eisenwerkstoff, der bis zu etwa 2 Ma-% Kohlenstoff und verschiedene zusätzliche Legierungselemente enthält. Die Legierungselemente werden im Falle von niedriglegierten Stählen in sehr geringen Mengen hinzugegeben, haben allerdings einen großen Einfluss auf die Gefüge, die Verarbeitung und die späteren mechanischen Eigenschaften. Um den unterschiedlichsten Anforderungen einer Vielzahl von Anwendungen mit exakt abgestimmten Eigenschaften gerecht zu werden, kommen Stähle verschiedenster Zusammensetzungen mit unterschiedlichen Gefügebestandteilen und -anteilen zum Einsatz.

2.1 Die verschiedenen Phasen und Gefügebestandteile in Stahl

Zunächst ist für eine Klassifizierung die Abgrenzung von verschiedenen Gefügebestandteilen wichtig. Hierzu müssen unterschiedliche Bestandteile erkannt und in vordefinierte Klassen eingeteilt werden. Gefügebestandteile können aus einer Phase, Bereiche mit einem einheitlichen kristallinen Ordnungszustand, oder mehreren Phasen, Phasengemischen, bestehen. Sie entstehen als Folge unterschiedlicher chemischer Zusammensetzungen des Stahls sowie verschiedener Prozessbedingungen wie Abkühlungstemperaturen oder -geschwindigkeiten, dem mechanischen Umformen oder anschließenden Wärmebehandlungen. Aus diesem Grund werden in diesem Kapitel die Entstehung der wichtigsten Gefügebestandteile von Stahl und das mikroskopische Erscheinungsbild der Hauptgefügebestandteile vorgestellt.

Wichtigstes Legierungselement der Eisenlegierung Stahl ist Kohlenstoff [3]. Die Entstehung der verschiedenen Phasen und somit der Gefügebestandteile ist im Eisen-Kohlenstoff-System durch die Modifikationsänderungen des Eisens bei einer Temperaturänderung und der daraus resultierenden variierenden Kohlenstofflöslichkeit bestimmt [4]. Je nachdem, ob der Kohlenstoff elementar oder als Eisenkarbid (Zementit / Fe_3C) ausgeschieden wird, werden das gleichgewichtsnah (stabil) und das metastabile Eisen-Kohlenstoff-System unterschieden [5]. Diese sind in Abbildung 2.1 zusammen mit den Phasen, die bei gleichgewichtsnaher Abkühlung entstehen, dargestellt. Kohlenstoffkonzentrationen über 2,06 Ma-% sind für Gusseisen relevant und werden daher in der vorliegenden Arbeit nicht weiter betrachtet [6].

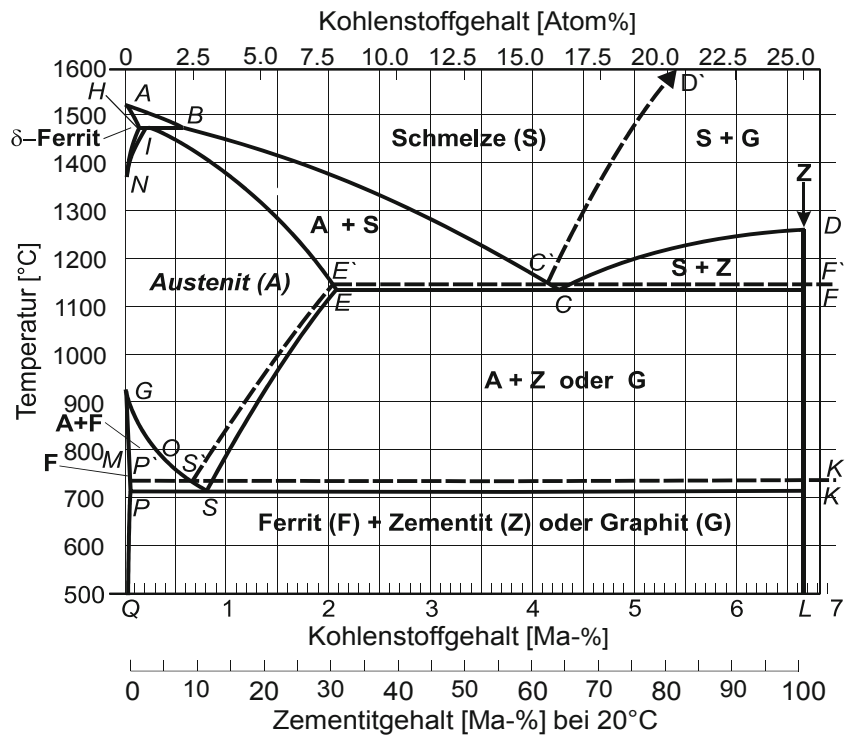


Abbildung 2.1: Eisen-Kohlenstoff-Diagramm mit den Phasen: Schmelze (S), δ -Ferrit (δ -F), Austenit (A), Ferrit (F), Zementit (Z), Graphit (G). Die gestrichelten Linien zeigen das stabile und die durchgezogenen Linien das metastabile System. Im Punkt C tritt das Eutektikum bei einer Temperatur von 1147°C auf. Die eutektoide Umwandlung erfolgt bei 723°C im Punkt S (modifiziert nach [6]).

Bei der Erstarrung der Schmelze werden Kohlenstoffatome in die Gitterlücken des Eisens eingebaut. Diese Lücken sind nicht groß genug, um die kleineren Kohlenstoffatome ohne Gitterverspannung aufzunehmen, so dass die Löslichkeit von Kohlenstoff in Eisen begrenzt ist. Durch eine Einlagerung bzw. Interstition von Kohlenstoffatomen in die Gitterlücken des Eisens entstehen verschiedene Eisenmischkristalle. Im Wesentlichen unterscheidet man die Phasen δ -Mischkristall (δ -Ferrit), γ -Mischkristall (Austenit), α -Mischkristall (Ferrit) und den Zementit (Fe_3C) [7]. Die Hochtemperaturphasen Austenit und δ -Ferrit sind bei Raumtemperatur nicht beständig. Der δ -Ferrit kann maximal 0,1 Ma-% Kohlenstoff bei einer Temperatur von 1500 °C lösen und hat eine kubisch-raumzentrierte (krz) Kristallstruktur. Austenit hat ein kubisch-flächenzentrierte (kfz) Kristallstruktur und kann bei 1147 °C maximal 2,06 Ma-% Kohlenstoff lösen. Die Phasen Ferrit und Zementit sind bei Raumtemperatur beständig. Ferrit hat mit seiner krz Kristallstruktur eine maximale Löslichkeit von Kohlenstoff von 0,02 Ma-% bei 723 °C und besitzt eine niedrige Härte. Wenn der Werkstoff mehr Kohlenstoff enthält, als im Mischkristall gelöst werden kann, entstehen

neue Phasen. Der Überschuss wird als eine Verbindung aus Eisen und Kohlenstoff mit 6,67 Ma-% Kohlenstoff (Zementit) und orthorhombischer Kristallstruktur ausgeschieden. Zementit weist eine hohe Härte auf [7].

Die beschränkte Aufnahmefähigkeit des Kohlenstoffs im Ferrits im thermodynamischen Gleichgewicht (Punkt P, Abbildung 2.1) ist durch die krz Kristallstruktur begründet, welche nur sehr kleine Zwischengitterlücken zeigt [8]. Die Hochtemperaturphase Austenit weist durch die kfz-Kristallstruktur deutlich größere Zwischengitterlücken auf und die maximale Löslichkeit des Kohlenstoffs übertrifft die des Ferrits um zwei Größenordnungen [6].

Die Stabilitätsbereiche der Phasen sind im Zustandsschaubild Eisen-Kohlenstoff (Abbildung 2.1) als Phasenfelder wiedergegeben [6]. Im thermodynamischen Gleichgewicht und einer Temperatur von 911 °C ist der Austenit im Falle von Reineisen die alleinig vorherrschende Phase. Mit zunehmendem Kohlenstoffgehalt dehnt sich der Stabilitätsbereich des Austenits zu tieferen Temperaturen, bis der eutektoide Punkt S erreicht wird, aus. Dieser liegt bei einer Temperatur von 723 °C mit einer Kohlenstoffkonzentration von 0,8 Ma-%. Unterhalb dieser Temperatur besteht das Gefüge aus den Phasen Ferrit und Zementit. Beide Phasen wechseln sich in Form von Lamellen ab. Diese Erscheinung ist der Gefügebestandteil Perlit (Phasengemisch). Die in Abbildung 2.1 dargestellten Phasenumwandlungen und Gleichgewichtskonzentrationen gelten nur für Bedingungen, die sich annähernd im thermodynamischen Gleichgewicht befinden. In realen Prozessen herrschen höhere Abkühlgeschwindigkeiten vor, wodurch die Diffusion von Kohlenstoff aus dem Austenit beeinflusst wird und Gefüge entstehen, welche sich sowohl in ihrem mikroskopischen Erscheinungsbild als auch in den Eigenschaften von den Gleichgewichtsgefügen unterscheiden [7],[9],[10],[11]. Auftretende Gefügebestandteile und deren Brinellhärte, die oft als Unterscheidungsindiz genutzt wird, können in sog. kontinuierlichen Zeit-Temperatur-Umwandlungsdiagrammen (ZTU-Diagrammen), wie in Abbildung 2.2 gezeigt, dargestellt werden [12]. Das ZTU-Diagramm ist für eine bestimmte Legierungszusammensetzung gültig und gibt an, zu welchem (Abkühlungs-) Zeitpunkt ein Gefügebestandteil entsteht [7].

Bei der bewussten Unterkühlung des Austenits wird die gleichgewichtsnaher Perlitbildung unterdrückt und weitere Gefüge wie Bainit und Martensit erzeugt, die andere Eigenschaften, wie z.B. eine höhere Härte, aufweisen können. Abbildung 2.2 zeigt ein ZTU-Diagramm am Beispiel des niedriglegierten, untereutektoiden Stahles 42CrMo4 mit 0,42 Ma-% Kohlenstoff.

In diesem sind die Umwandlungsbereiche der verschiedenen Gefügebestandteile (Martensit, Bainit, Perlit, Ferrit) durch Linien abgetrennt. Beim Abkühlen werden diese Bereiche je nach Abkühlgeschwindigkeit durchlaufen, was zu einer Umwandlung des Austenits in den entsprechenden Gefügebestandteil führt [10],[13]. Die Zahlen entlang der Linien geben an, wie groß der Anteil des Gefügebestandteils im Endgefüge ist. Für langsame Abkühlung (Kurve I) läuft die Umwandlung gleichgewichtsnah entsprechend Abbildung 2.1 ab [6].

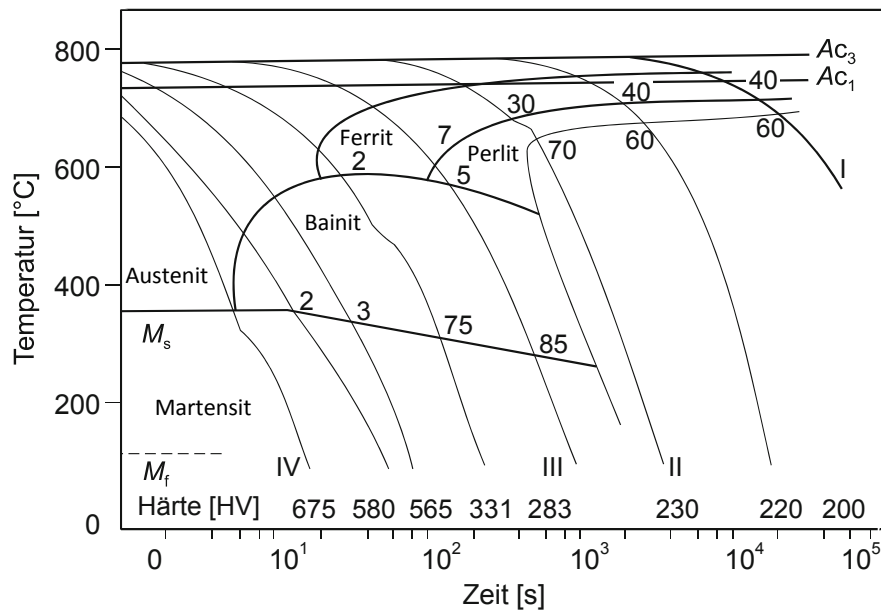


Abbildung 2.2: Darstellung eines kontinuierlichen ZTU-Diagramms mit einer Austenitisierungstemperatur von 850 °C und 10 min Haltezeit eines 42CrMo4 Stahls. Bei langsamer Abkühlung wird der Bereich Ferrit/Perlit durchlaufen. Bei schnelleren Abkühlungen geht das Gefüge in ein gleichgewichtsfernes Bainit- und Martensitgefüge über. Die Härte steigt ebenfalls mit der schnelleren Abkühltemperatur aufgrund der Konzentration an Fehlern an. M_s und M_f sind die Temperaturen für Beginn (start) und Ende (finish) der Martensitbildung. Die Zahlen entlang der Abkühlkurven kennzeichnen die Gefügemengen in Prozent (modifiziert nach [6]).

In Abhängigkeit von der Legierungszusammensetzung unterscheiden sich ZTU-Diagramme in Bezug auf die auftretenden Phasen, die Gefügeanteile und die Umwandlungstemperaturen. Neben der Abkühlgeschwindigkeit haben sowohl die Austenit-Korngröße als auch das Zulegieren verschiedener Elemente einen signifikanten Einfluss auf die zeitliche Abhängigkeit der Phasenbildung und bestimmen die Entstehung der verschiedenen Gefügebestandteile [7]. Zudem werden in Umform-ZTU-Diagrammen auch Umformbedingungen des Austenits mit berücksichtigt [4],[14]. Durch gezielte Abkühl- und Umformschritte ist es möglich, die Phasenbildung zu beeinflussen und zu steuern, was die

Vorraussetzung für die Herstellung verschiedener Stahlgüten mit definierten Eigenschaften dargestellt [15]. Für eine Abgrenzung der verschiedenen Bestandteile und eine Korrelation mit Gefügeeigenschaften ist eine genaue Beschreibung der Gefügebestandteile unumgänglich.

2.1.1 Perlit

Bei sehr langsamer Abkühlung (Kurve I, Abbildung 2.2) werden vom Austenit ausgehend nur die Gebiete von Ferrit und Perlit durchlaufen, sodass ein Gefüge aus Perlit und Ferrit entsteht, welches näherungsweise dem thermodynamischen Gleichgewicht entspricht. Der Gefügebestandteil Perlit besteht klassisch aus den beiden Phasen Ferrit und Zementit, welche sich in feinen Streifen (sog. Lamellen) abwechseln. Die Lamellen entstehen durch eine schichtweise Diffusion von Kohlenstoff in den Austenit. Dadurch bilden sich Lamellen mit kleinen (0,02 Ma-% C, Ferrit) bzw. großen Kohlenstoffgehalten (6,67 Ma-% C, Zementit) [7].

Bei einer mikroskopischen Betrachtung erscheint der Perlit im Lichtmikroskop (LIMI) als perlmuttartig reflektierendes Gefüge und bei hoher Vergrößerung, beispielsweise im Rasterelektronenmikroskop (REM), als lamellenartiges schwarz-weißes Gefüge [7]. In Abbildung 2.3 ist eine REM-Aufnahme eines ferritisch-perlitischen Gefüges zu sehen. Nach einer Ätzung kann die Perlitstruktur durch ihre typischen Lamellen aus Zementit, welcher durch die Ätzung nicht so stark angegriffen wird, und Ferrit erkannt werden. Die Ferritkörner sind durch sichtbare Korngrenzen voneinander getrennt und weisen im Korninneren wenig Struktur bzw. Kontrast auf.

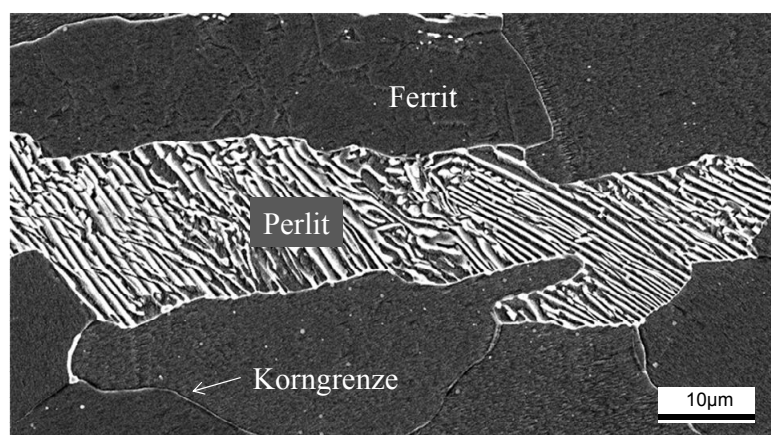


Abbildung 2.3: REM-Aufnahme eines geätzten perlitisch-ferritischen Stahls. Die Ferritkörner sind durch die Korngrenzen voneinander getrennt und die Zweitphase zeigt eine für Perlit typische Lamellenstruktur.

Die Lamellenlänge und -breite des Perlits hängt von der Höhe der Unterkühlung und der Umwandlungsgeschwindigkeit ab. Je schneller die Abkühlung desto kleiner und dünner sind die Lamellen in ihrer Gestalt [6]. Die Lamellen können hierbei in gerader oder in gekrümmter Form wachsen [16].

2.1.2 Martensit

Bei sehr hohen Abkühlgeschwindigkeiten (Abschreckung, Kurve IV, Abbildung 2.2) entsteht aus dem unterkühlten Austenit diffusionslos und displaziv der Gefügebestandteil Martensit. Unterhalb der sog. Martensitstarttemperatur (M_s) kann der Kohlenstoff nicht mehr aus dem Austenit heraus diffundieren. Als Folge davon werden bei der Umwandlung des austenitischen kfz-Gitters in das ferritische krz-Gitter Kohlenstoffatome zwangsgelöst [7]. Je nach Kohlenstoffgehalt resultiert eine unterschiedlich starke Verzerrung des ehemals kubischen Kristalls zu einer tetragonalen Struktur [6]. Die tetragonale Verzerrung nimmt mit dem Kohlenstoffgehalt zu. Dies kann beispielsweise, je nach Gitterverzerrung, zu einer signifikanten Härtesteigerung führen, da diese Verzerrungen Versetzungsbewegungen behindern können [8].

Abhängig vom Kohlenstoffgehalt können unterschiedliche Ausprägungen des Martensits auftreten, die von lattenförmig bis plattenförmig reicht. Plattenförmige Strukturen (sog. Plattenmartensit) entstehen bei Kohlenstoffgehalten über 1,4 Ma-% und niedrigeren Bildungstemperaturen. Der Plattenmartensit unterscheidet sich vom sog. Lattenmartensit durch die diskusförmige Morphologie der Platten, welche unter verschiedenen Winkeln zueinander wachsen [6]. Der Lattenmartensit entsteht bei Kohlenstoffgehalten unter 0,5 Ma-% und höheren Temperaturen, die näher an der Martensitstarttemperatur liegen. Die Latten wachsen in Form von Blöcken aus parallelen, kleiner 1 μm breiten Latten in den Austenit. Diese Latten wachsen schlagartig, bis ein Paket ein anderes Paket oder die ehemalige Austenitkorngrenze erreicht [6].

In Abbildung 2.4 ist eine schematische Darstellung der Beziehung der martensitischen Lattenstruktur zum ehemaligen Austenitkorn, sowie ein ferritisch-martensitisches Gefüge eines niedriglegierten und kohlenstoffarmen Stahls gezeigt.

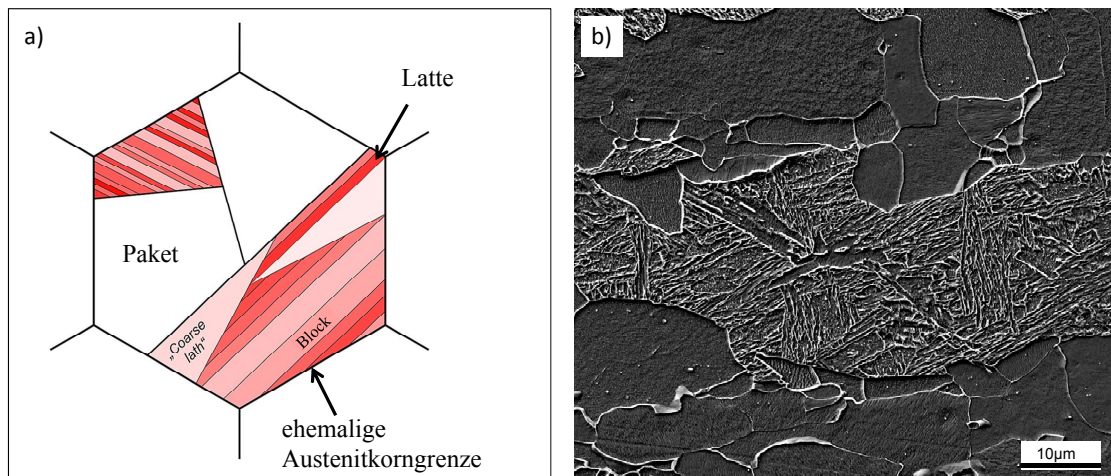


Abbildung 2.4: Schematische Darstellung der Beziehung der martensitischen Lattenpakete und dem ehemaligen Austenitkorn a) und eine REM-Aufnahme eines ferritisch-martensitischen Gefüges b) (modifiziert nach [17]).

Bei Kohlenstoffgehalten zwischen 0,5 und 1,4 Ma-% entstehen Mischformen von Latten und Platten. Die auftretenden Missorientierungsbeziehungen des Martensits mit dem ehemaligen Austenit sind spezifisch für den Martensit. Zahlreiche Quellen, wie z.B. von Morito et al. [18],[19] oder Kitahara et al. [20], zeigen die kristallographische Hierarchie des Lattenmartensits auf der Grundlage der Kurdjumov-Sachs, Nishiyama-Wassermann oder Greninger-Troiano Orientierungsbeziehung zwischen Martensit und dem ehemaligen Austenitkorn [21],[22],[23]. Durch die verschiedenen kristallographischen Orientierungen entsteht ein unterschiedlicher Ätzangriff für jede Latte, sodass diese in verschiedenen Farbabstufungen in den LIM-Aufnahmen sichtbar werden. Dies kennzeichnet das typische Erscheinungsbild von Martensit auf LIM-Aufnahmen.

Eine weitere Form ist der angelassene Martensit, der durch eine Wärmebehandlung bei niedrigen Temperaturen ($> 100\text{ °C}$) entsteht. Diese Temperatur ist ausreichend, um einen Teil des zwangsgelösten Kohlenstoffs als Zementit auszuscheiden. Dies ist sinnvoll, wenn die Härte, Sprödigkeit und Festigkeit des Werkstoffs reduziert werden soll. Angelassener Martensit zeigt das nadelförmige Erscheinungsbild des Martensits mit kleinen Zementitausscheidungen, welche statistisch verteilt vorliegen. Die Erscheinungsform ist dadurch der des unteren Bainits (siehe Kapitel 2.1.3) sehr ähnlich. Eine Unterscheidung der beiden Gefügebestandteile ist nur anhand der Anordnung und Ausrichtung des Zementits innerhalb der Latten möglich. Bei Martensit liegt der Zementit ungeordnet und bei Bainit

geordnet in paralleler Ausrichtung und in einen Winkel von circa 60° , bezogen auf die Achse der Bainitlatte, vor. Eine Ausscheidung des Zementits beim Martensit kann ebenfalls durch sog. Selbstanlasseffekte erreicht werden [24],[25].

Austenit

Die Hochtemperaturphase Austenit kann durch die Prozessführung als sogenannter Restaustenit noch im Endgefüge enthalten sein. Durch Diffusion während der Umwandlungsvorgänge können austenitische Bereiche erhöhte Kohlenstoffgehalte haben und stabilisiert werden. Der Volumenanteil des Restaustenit, sowie dessen Morphologie und Kohlenstoffgehalt, haben Einfluss auf die Festigkeit und Duktilität von Stählen [26]. Die Charakterisierung und Unterscheidung dieses Gefügebestandteils von Martensit ist jedoch auf mikroskopischen Aufnahmen schwierig. Die restaustenitischen Bereiche können durch äußere Einflüsse, z.B. durch mechanische Spannungen, bei der Präparation in Martensit umklappen, sodass eine eindeutige Unterscheidung zwischen Martensit und Austenit nur eingeschränkt möglich ist. Die auch als Martensit / Austenit (sog. martensitisch-austenitische Bestandteile, MA) bezeichneten Bereiche befinden sich vor allem in Kornzwickeln oder an Korngrenzen [27].

2.1.3 Bainit

Bei gleichgewichtsferner Abkühlung mit Geschwindigkeiten, die zu hoch für die Bildung von Perlit und zu niedrig für die Bildung von Martensit sind (Kurve III, Abbildung 2.2), kann das Zwischenstufengefüge Bainit entstehen. Es gibt bis heute viele wissenschaftliche Diskussionen über die Mechanismen der Bainitbildung sowie über die Klassifizierung verschiedener Bainitmorphologien. Die Entstehung dieses Gefügebestandteils ist im Wesentlichen durch zwei Schritte bestimmt. Zunächst bildet sich der sog. bainitische Ferrit (der auch als nicht polygonaler oder irregulärer Ferrit bezeichnet wird) an den Nukleationsstellen des Austenits, wie z.B. den Korngrenzen. Ähnlich zu der Entstehung von Martensit findet eine displazive Umwandlung bei der Entstehung der Ferritlatten bzw. -platten statt (im Folgenden bezieht sich der Begriff "Latten" immer auf beide Erscheinungsformen). Die von der Austenitkorngrenze wachsenden bainitischen Ferritlatten sind im klassischen Fall sehr fein und wachsen als Bereiche mit paralleler Orientierung. Der Kohlenstoff kann aufgrund der geringeren Löslichkeit in Ferrit und der höheren Temperatur nicht zwangsgelöst

werden. Je nach Entstehungstemperatur kann er mehr oder weniger aus dem Ferrit diffundieren und scheidet sich in Form von Karbiden aus [24],[28]. Die Karbid / Zementit-ausscheidungen können sich an den ferritischen Lattengrenzen oder innerhalb der Latten anlagern. Im Vergleich zu Martensit bleibt weniger Kohlenstoff in Zwangslösung und die Härte ist niedriger [6].

Bainitische Gefüge bestehen oft aus einer Vielzahl von bainitischen Unterklassen, was die Identifizierung erschwert. Grundsätzlich enthält der Bainit die beiden Phasen Ferrit und Zementit und entsteht im Temperaturbereich von ca. 250 – 550 °C [24]. Allerdings können in der großen Vielfalt des Bainits auch karbidfreie bainitische Strukturen auftreten. Es können bei der Entstehung je nach Temperatur verschiedene Morphologien entstehen [24]. Die drei klassischen Bainitformen, welche neben einer Vielzahl von Mischformen auftreten können, sind in Abbildung 2.5 gezeigt.

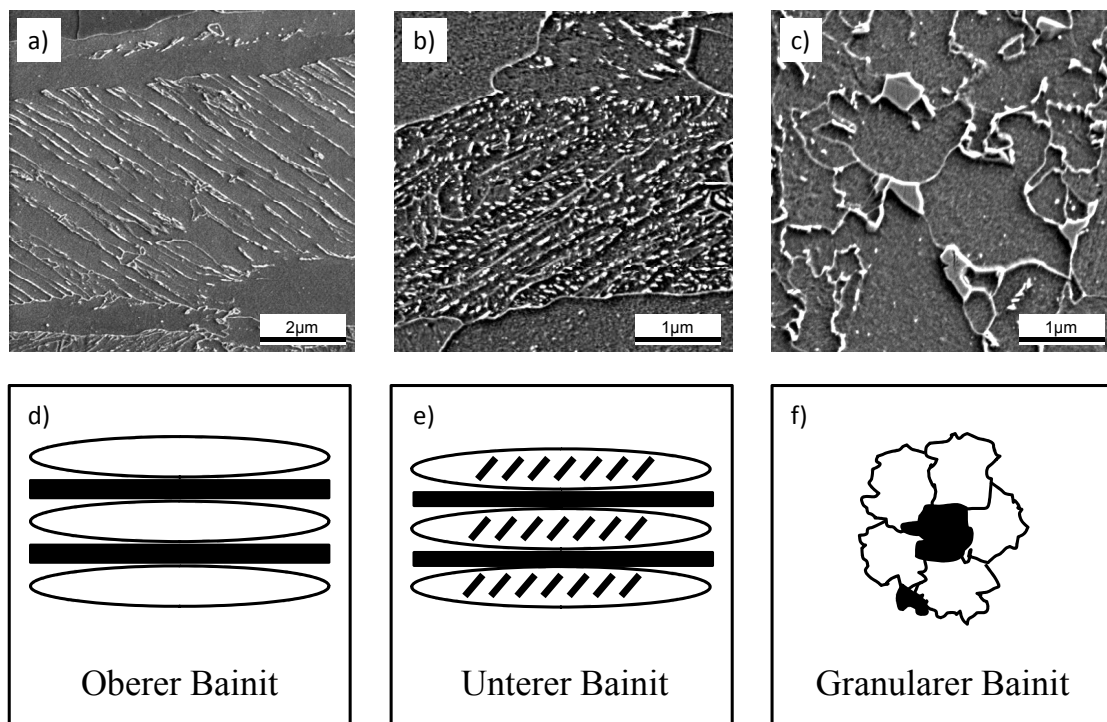


Abbildung 2.5: REM-Aufnahmen und schematische Darstellungen der Morphologie der Unterklassen a) oberer Bainit, b) unterer Bainit und c) granularer Bainit mit Martensit / Austenit-Inseln als kohlenstoffreiche Bereiche. In der REM-Aufnahme ist der bainitische Ferrit dunkel und der Zementit und die Korngrenzen hell dargestellt. Die schematischen Darstellungen d), e) und f) sind an LIMI-Aufnahmen angeglichen, in welchen der bainitische Ferrit hell und der Zementit bzw. die kohlenstoffreiche Bereiche dunkel erscheinen (modifiziert nach [29],[30]).

Der klassische obere Bainit, der sich in einem Temperaturbereich von ca. 400 – 550 °C bildet, besteht aus dünne Ferritlatten, die durch die ausgeschiedenen Karbide voneinander getrennt sind, wie in Abbildung 2.5 dargestellt. Durch ausreichend hohe Temperaturen kann der Kohlenstoff aus den Ferritlatten an die Lattengrenzen diffundieren [24],[31],[32]. Der klassische untere Bainit, der im Temperaturbereich von 250 – 400 °C entsteht, lässt sich durch seine Karbidausscheidungen innerhalb der Latten vom oberen Bainit unterscheiden (Abbildung 2.5). Bei geringeren Temperaturen kann der Kohlenstoff nicht vollständig zu den Lattengrenzen diffundieren und es findet die parallele Anlagerung der Karbide in den Ferritlatten in einem charakteristischen Winkel von 60° zur Achse der Ferritlatte statt. Die Karbidausscheidungen weisen alle eine ähnliche kristallographische Orientierung auf und zeigen lediglich eine Länge von maximal 500 nm. Diese Karbide führen dazu, dass im Vergleich zum oberen Bainit bei gleichem Kohlenstoffgehalt der Legierung weniger Karbidausscheidungen an den Grenzen der Ferritlatten entstehen [24],[31],[30]. Dies kann beispielsweise zu höheren Zähigkeiten und Festigkeiten sowie einer Hemmung des Risswachstums führen [24]. Eine weitere Form ist der granulare Bainit, der aus irregulärem Ferrit mit diskreten Inseln einer Zweitphase, z.B. Zementit, Martensit oder Restaustenit, besteht, die fein verteilt zwischen den Ferritkörnern vorliegen [32],[33].

Die verschiedenen Bainitarten können die mechanischen Eigenschaften auf sehr unterschiedliche Weise beeinflussen, weshalb das Verständnis der jeweiligen Ferritmorphologie und die Anordnung des Zementits oder der Zweitphase für die Entwicklung neuer Stähle, besonders im Bereich der hochfesten Stähle, von großer Bedeutung ist. Die hohe Festigkeit von bainitischen Gefügen ist durch ihre sehr feine Korngröße begründet. Diese ist auf die Kombination des Displaziv- / Diffusionsmechanismus des Ferritwachstums zurückzuführen [34]. Durch die Feinkornstruktur verbessert sich nicht nur die Festigkeit, sondern zusätzlich die Zähigkeit und Duktilität der Stähle.

Zusammenfassung

Aufgrund der Vielzahl an Einflussfaktoren auf die Gefügeentstehung gibt es keine scharfe Abgrenzung der Gefügebestandteile sondern einen kontinuierlichen Übergang der Morphologien. Auf Mikroskopaufnahmen sind dadurch neben den Hauptgefügebestandteilen eine Vielzahl an Zwischenformen zu finden. Die beschriebenen Hauptgefügebestandteile Perlit, Martensit, Bainit und Ferrit können je nach Herstellungsprozess alleiniger Gefügebestandteil auf mikroskopischen Aufnahmen sein oder nach prozesstechnischer Möglichkeit nebeneinander vorliegen. In der vorliegenden Arbeit werden sogenannte zweiphasige Gefüge zum Aufbau der Klassifizierung verwendet. Der Begriff Phase bezieht sich hierbei auf einen Bereich, der einem Gefügebestandteil zugeordnet werden kann. Diese Gefüge bestehen aus einer Grundstruktur aus Ferrit (sog. ferritische Matrix oder Matrixphase) mit diskreten Bereichen einer Zweitphase, welche eine klassische perlitische, martensitische, bainitische Struktur oder eine Zwischenform aufweisen kann. In den Klassifizierungsschemata in Kapitel 2.3 werden die verschiedenen, in der Literatur beschriebenen, Ausprägungen der Gefügebestandteile vorgestellt und die Möglichkeiten einer Abgrenzung sowie eine Unterteilung in Matrixphase und Zweitphase dargestellt.

2.2 Gefügeanalyse

Eine Möglichkeit die verschiedenen Phasenbereiche und die Gefügebestandteile von Stahl sichtbar zu machen und Merkmale für die Morphologie oder für Phasenanteile aus Gefügen zu extrahieren, bieten die unter dem Namen „Quantitative Gefügeanalyse“ zusammengefassten Methoden [35],[36],[37]. Die Gefügeanalyse beinhaltet die metallographische Präparation, die Kontrastierung, qualitative und quantitative Messverfahren sowie abbildende Verfahren zur Visualisierung der Gefüge und deren Analyse. Durch die zunehmende Komplexität der Gefüge in modernen Stählen mit einer Vielzahl an Gefügebestandteilen wird der Anspruch an diese Verfahren zunehmend größer. Die Anzahl an Informationen, die notwendig sind um verschiedene Strukturen hinreichend quantitativ zu beschreiben, steigt stetig an. Neben Daten zu Phasenanteilen, Morphologie und der Anordnung der Gefügebestandteile werden vermehrt Informationen über die auf den mikroskopischen Aufnahmen sichtbare Struktur (sog. Substruktur der Gefügebestandteile, Bildtextur) oder Kristallographie benötigt, um die verschiedenen Gefügebestandteile voneinander zu trennen [38]. Die Extraktion dieser Merkmalsdaten beispielsweise aus mikroskopischen Aufnahmen stellt eine große Herausforderung dar. Ursprünglich basierten diese Auswertungen auf der visuellen Begutachtung und der manuellen Auswertung von lichtmikroskopischen Aufnahmen durch Experten. Diese Methoden wurden mit zunehmenden technischen Möglichkeiten zu höherauflösenden Mikroskopietechniken und computergestützten Methoden weiterentwickelt und automatisiert.

2.2.1 Gefügekontrastierung

Im Bereich der Gefügeklassifizierung werden hauptsächlich mikroskopische Aufnahmen geätzter Gefüge zur Beschreibung der Morphologie der unterschiedlichen Gefügebestandteile und deren Klassifizierung genutzt [39],[40]. Bei Stählen existieren nur wenige Methoden, die Gefügebestandteile sichtbar machen und ohne ein Kontrastierungsverfahren an der polierten Probenoberfläche durchgeführt werden können, wie beispielsweise durch Messungen der Elektronenrückstreubeugung im REM (engl. electron backscatter diffraction, EBSD [41]). In den klassischen Methoden der Gefügequantifizierung werden die Gefüge mittels metallographischer Ätzungen kontrastiert, indem eine Topographie erzeugt wird, welche durch mikroskopische Verfahren sichtbar gemacht werden kann [42],[43].

Neben (elektro-) chemischen Ätzverfahren kommen in der Metallographie ebenfalls thermische und optische Ätzmethoden zum Einsatz [44].

Für Stähle und vor allem für niedriglegierte Stähle, wie sie in der vorliegenden Arbeit verwendet werden, werden für die Kontrastierung überwiegend (elektro-) chemische Ätzungen eingesetzt. Bei diesen Redox-Reaktionen steht die Abgabe von Elektronen (Oxidation) im Gleichgewicht mit der Aufnahme von Elektronen (Reduktion). Welches Element oxidiert oder reduziert wird, ist abhängig vom chemischen Potential des Elements nach der elektrochemischen Spannungsreihe [45]. Bei den Gefügen haben verschiedene Gefügebestandteile durch die chemische Zusammensetzung oder lokale Inhomogenitäten wie Korngrenzen unterschiedliche chemische Potentiale [46]. Die verschiedenen Gefügebestandteile werden dadurch unterschiedlich stark von der Ätzlösung angegriffen. Bei den Reaktionen kann entweder Material abgetragen und/oder als Schicht aufgebaut werden, sodass ein selektiver Abtrag der Bestandteile und/oder ein selektiver Aufbau von Schichten auf der Probenoberfläche und somit eine Topographie entsteht. Diese Topographie kann mikroskopisch durch die unterschiedliche Lichtbrechung im LIMI [44] oder durch einen Topographiekontrast im REM [41], wie in Abbildung 2.6 gezeigt, abgebildet werden [46].

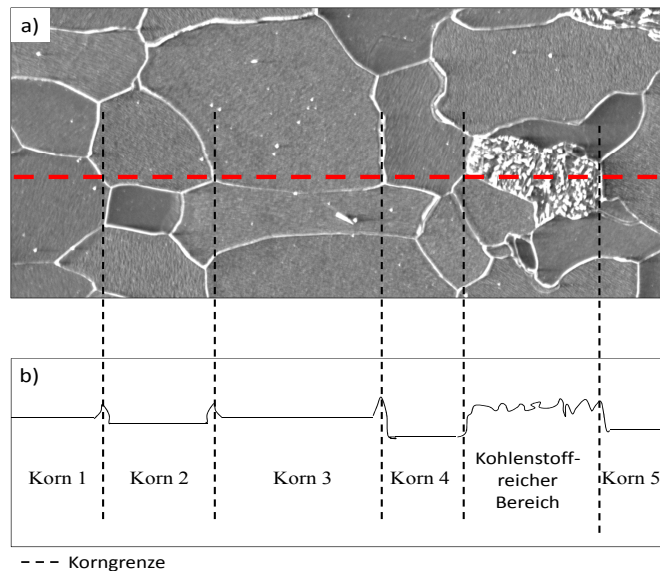


Abbildung 2.6: Darstellung einer Strukturätzung am Beispiel einer REM-Aufnahme. REM-Aufnahme im Sekundärelektronenkontrast mit Ferritkörnern und einem kohlenstoffreichen Bereich a). Höhenprofil entlang der roten Linie b). Die Kornflächen werden aufgrund unterschiedlicher Potentiale schneller abgetragen als die Korngrenzen. Orientierungsunterschiede zwischen den Ferritkörnern, die ebenfalls das Potential beeinflussen, führen zudem zu einem unterschiedlichen Abtrag der Ferritkörner.

In dem Beispiel in Abbildung 2.6 sind die Korngrenzen weniger stark angegriffen als die Kornflächen und bilden somit eine Erhöhung. Die Kornflächen zeigen einen unterschiedlich starken Abtrag, welcher auf Potentialunterschiede verschiedener Kornorientierungen zurückgeführt werden kann [47].

Je nachdem ob Material abgetragen oder eine Schicht aufgebaut wird, unterscheidet man zwischen Strukturätzungen und Farb- bzw. Niederschlagsätzungen [47]. Bei Strukturätzungen, wie beispielsweise der Nital-Ätzung [46], werden die Kornflächen stärker angegriffen und somit schneller abgetragen als kohlenstoffreichere Zweitphasebereiche sowie Korngrenzen. Kohlenstoffreichere Bereiche weisen neben dem höheren Kohlenstoffanteil oftmals zusätzlich eine veränderte Konzentration an verschiedenen Legierungselementen auf und haben dadurch ein anderes chemisches Potential als ferritische Bereichen. Im Gegensatz dazu bilden sich bei Farbätzungen durch Niederschlag Interferenzschichten in einer bestimmten Dicke auf Bereichen mit gleichem chemischem Potential, die als unterschiedliche Färbungen je nach Dicke sichtbar werden [40],[48]. Zu den bekanntesten Farbätzungen im Bereich der niedrigkohlenstoffhaltigen Stähle gehören die Beraha-Ätzung [35],[45], die LePera-Ätzung [44] und die Klemm-Ätzung [49]. Die Vorgehensweise für diese Ätzungen ist in zahlreichen Standardwerken der Metallographie beschrieben [46],[48].

Durch die Ätzung können die verschiedenen Gefügebestandteile aus Kapitel 2.1 sichtbar gemacht und ihre Unterschiede mit mikroskopischen Methoden visuell dargestellt werden. Dies ist eine der wesentlichen Voraussetzung für die Klassifizierung der unterschiedlichen Bestandteile. Ein großes Problem chemischer Ätzungen ist ihre Reproduzierbarkeit, da die Zeit, die Temperatur und ebenfalls Umweltparameter, wie die Luftfeuchtigkeit, einen Einfluss auf die Ergebnisse zeigen. Um reproduzierbare Ergebnisse zu erreichen, ist es deshalb notwendig, die für die gegebene Aufgabenstellung passende Ätzrezeptur auszuwählen und die Einflussparameter konstant zu halten [50].

2.2.2 Korrelative Analysemethoden

Traditionelle Analysemethoden für mikroskopische Abbildungen geätzter Gefüge basieren auf Normen mit verschiedenen Zähl-, Schätz- oder Vergleichsverfahren, wie beispielsweise die DIN EN ISO 643 oder die ISO 14250 [51],[52]. Neben der Anwendung dieser klassischen Verfahrensnormen kommen zusätzlich objektbasierte Auswertemethoden zum Einsatz. Mit diesen lassen sich Gefügekennwerte, wie zum Beispiel verschiedene Phasenbereiche als Verteilungen wiedergeben [53],[54]. Ferner können über stereologische Verfahren bei Verfügbarkeit eines repräsentativen Volumens auch die räumlichen Anordnungen der Gefügebestandteile berechnet werden [55]. Diese Methoden dienen dazu, quantitative Werte (Merkmale) für die Korngröße, Morphologie oder Flächenanteile von Phasen oder Gefügebestandteilen aus den Gefügaufnahmen auszulesen und die Unterschiede für die verschiedenen Strukturen anhand von messbaren Daten darzustellen. Die Beurteilung von geätzten Gefügen auf Basis der Lichtmikroskopie gehört heute noch zu den Standardmethoden, da sie eine schnelle Auswertung großer Flächen erlaubt.

Für die Gefügeanalyse moderner Stähle wird die Anwendbarkeit der Standards auf Basis der Lichtmikroskopie durch die immer feineren Strukturen im Submikrometerbereich, zum Beispiel bei bainitischen Strukturen, erschwert. Dies ist hauptsächlich durch die Auflösungsgrenze der halben Wellenlänge des sichtbaren Lichts begründet. Um diese feinen Strukturen charakterisieren zu können werden hochauflösende Elektronenmikroskope genutzt [56]. Durch eine adäquate Kontrastierung können die Gefügebestandteile im REM abgebildet und bildtechnisch erfasst werden [57],[58]. Zusätzlich können unter der Nutzung von phasenspezifischen Versetzungsdichten mittels EBSD Informationen aus den Gefügen ausgelesen werden [59],[60],[61]. Aus EBSD-Messungen können beispielsweise die Qualität der EBSD-Pattern oder verschiedene Missorientierungsparameter (engl. grain average misorientation, kernel average misorientation, grain orientation spread) ausgewertet werden [62],[63]. Aus diesem Grund finden zusätzlich zur Morphologie erste EBSD-basierte Merkmale in neueren Ansätzen der Gefügecharakterisierung und -klassifizierung für Stähle und andere Werkstoffe Anwendung [33],[61]. Bis heute existieren noch keine allgemeingültigen Referenzen oder Standards zur Abgrenzung der verschiedenen Gefügebestandteile mittels EBSD-Parameter. In Ringversuchen konnten große Streuungen der Quantifizierungsergebnisse gezeigt werden, was darauf zurückzuführen ist, dass viele

verschiedene Einstellungen, wie z.B. die Probenpräparation, der experimentelle Messaufbau, die Messparameter und die Nachbearbeitung, einen Einfluss auf die Messergebnisse haben [38]. Außerdem zeigen beispielsweise martensitische und bainitische Gefüge fließende Übergänge, die eine Abgrenzung der Gefügebestandteile durch das Definieren eines Schwellwerts erschweren. Deshalb werden in vielen neueren Ansätzen EBSD-Parameter, zusätzlich zu morphologischen Merkmalen von Gefügebestandteilen, als Entscheidungskriterium hinzugefügt [61]. Durch eine Korrelation mehrerer Methoden können somit verschiedene Informationen kombiniert und mehrdimensionale Schwellwerte für eine Trennung von Gefügebestandteilen definiert werden. Die Herausforderung einer vollumfassenden, skalenübergreifenden Charakterisierung besteht darin, die vielfältigen Informationen der exakt gleichen Probenstelle aus verschiedenen Aufnahmequellen zu sammeln und zu kombinieren [64].

Für die Gefügeanalyse und -klassifizierung ist vor allem die Überlagerung von Gefügeaufnahmen desselben Bereichs von unterschiedlichen mikroskopischen Verfahren (sog. Bildregistrierung [65]) von großer Bedeutung. Für eine vollständige Beschreibung der Gefügebestandteile werden häufig LIM- und REM-Aufnahmen genutzt. Die Erstellung der Bildaufnahmen beruht auf unterschiedlichen physikalischen Methoden und erfolgt unter verschiedenen Perspektiven und Auflösungen. Somit ist eine einfache rotatorische oder translatorische Anpassung der Aufnahmen für die Überlagerung nicht möglich. Unter Bildregistrierung wird der Prozess der Überlagerung von zwei oder mehreren Bildern verstanden, die an derselben Probenstelle zu unterschiedlichen Zeiten, aus verschiedenen Blickwinkeln und / oder mit verschiedenen Sensoren aufgenommen wurden [65].

Die Registrierung richtet zwei Bilder (das Referenzbild und weitere erfasste Bilder) geometrisch aus. Die Überlagerung folgt grundlegend den folgenden Schritten. Zunächst erfolgen die Merkmalerkennung und der Merkmalsabgleich auf beiden Bildern. Im nächsten Schritt wird die Zuordnung der Merkmale durchgeführt und ein Transformationsmodell erstellt. Schließlich werden eine Bildtransformation und eine Skalierung durchgeführt [65]. Eine solche Registrierung kann beispielsweise mit dem Open-Source-Tool FiJI durchgeführt werden, wie in Abbildung 2.7 dargestellt [36],[66]. Die registrierten Bilder bieten die Möglichkeit, korrelative Informationen aus den Bildern auszulesen.

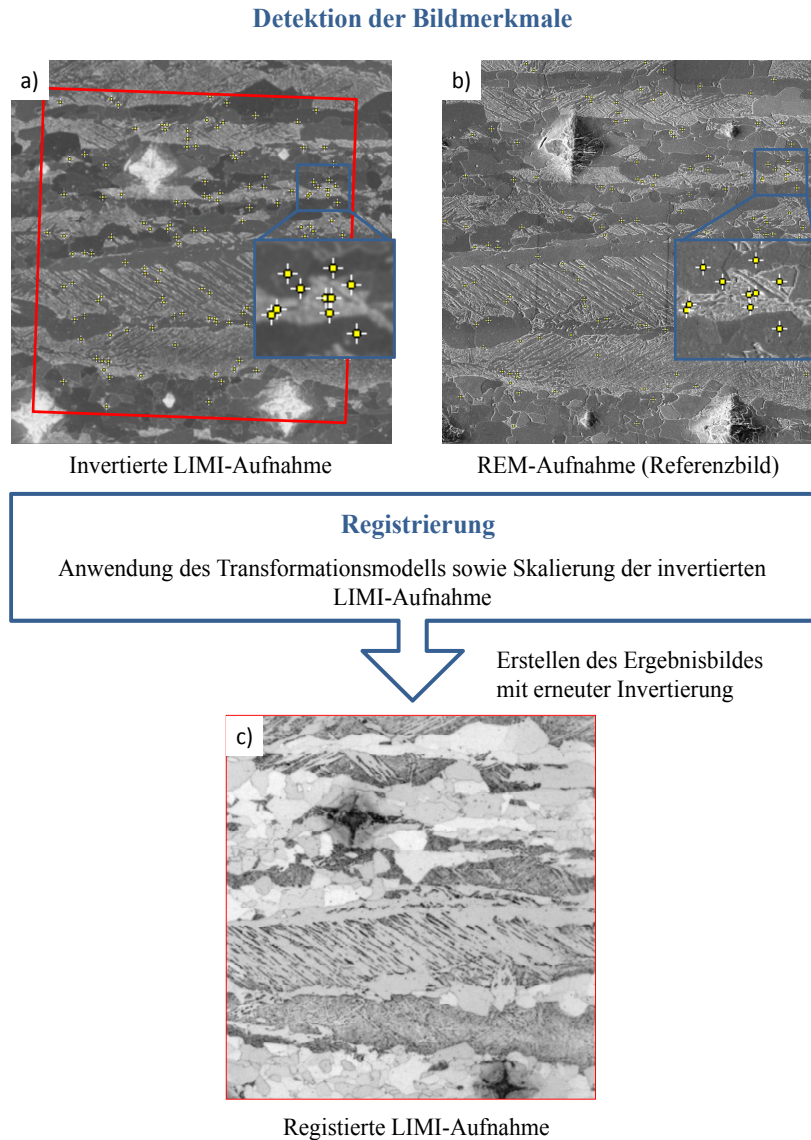


Abbildung 2.7: Schematische Darstellung des Arbeitsablaufs der Bildregistrierung am Beispiel eines zweiphasigen Gefüges. Die invertierte LIMM-Aufnahme a) und die REM-Aufnahme b) der gleichen Probenposition mit vergrößertem Ausschnitt der extrahierten Merkmale (gelbe Kreuze) vor der Registrierung. Registrierte LIMM-Aufnahme c), welche an das REM-Referenzbild angeglichen ist.

In der während der vorliegenden Arbeit entstandenen Veröffentlichung von Britz et al. ist ein entsprechender Arbeitsablauf zur Registrierung von LIMM- und REM-Aufnahmen und einer Extraktion von Objektdaten zur Merkmalerzeugung gezeigt [36]. Aus den registrierten Bildern können mittels computergestütztem Analyseverfahren verschiedene Informationen über die Gefügebestandteile ausgelesen und für eine vollumfassende Gefügeanalyse kombiniert werden.

2.2.3 Quantitative Gefügeanalyse

In der quantitativen Gefügeanalyse wird das Gefüge von Werkstoffen durch geeignete Merkmale (Gefügeparameter) quantitativ charakterisiert. Es werden die Art und die Menge durch Grenzflächen (Korn- bzw. Phasengrenzen) getrennter Gefügebestandteile und deren geometrische Merkmale (z.B. Größe, Form, Verteilung und Orientierung) bestimmt [13].

Neben den etablierten Verfahren gibt es eine Vielzahl neuer verfeinerter computergestützter Analyseverfahren für das Auslesen von Merkmalsdaten aus mikroskopischen Aufnahmen, die die Auswertung effektiver, aber auch komplexer machen [67],[36]. Diese ersetzen zunehmend die visuelle Begutachtung durch Experten, um eine objektive und reproduzierbare Beurteilung von Gefügen zu erzielen. Diese Methoden ermöglichen es, aus einer Gefügaufnahme unterschiedliche Merkmalsdaten über die Morphologie von Gefügebestandteilen oder deren Substruktur (Bildtextur) auszulesen, wie in Abbildung 2.8 schematisch dargestellt [35],[36],[37].

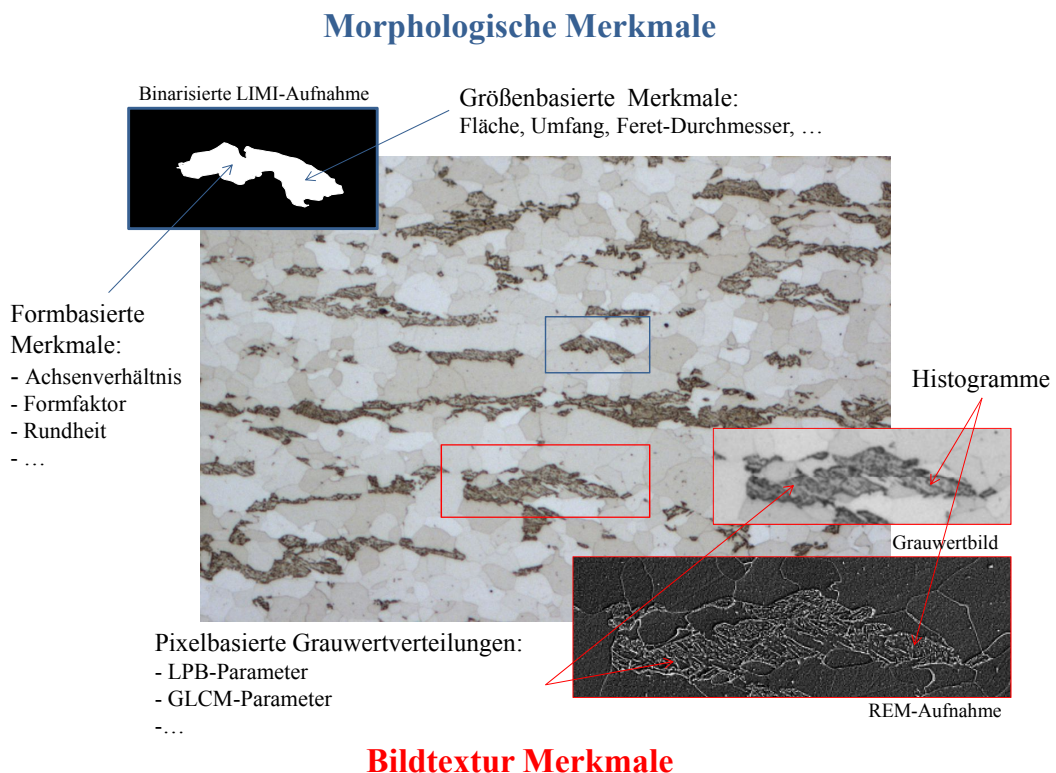


Abbildung 2.8: Verschiedene Möglichkeiten morphologische oder texturbasierte Merkmale aus mikroskopischen Aufnahmen mittels Bildanalyse auszuwerten.

Die Standardmethode der computergestützten quantitativen Gefügeanalyse ist die pixelbasierte Bildanalyse von geätzten Gefügen, in welcher ein Pixel die kleinste Einheit der digitalen Bildinformation repräsentiert. Jedes Pixel eines Bildes hat eine definierte Größe, eine Position und einen Farb- bzw. Grauwert. Pixel, die ähnliche Farb- bzw. Grauwerte auf LIMI-Aufnahmen nach Ätzung haben, können durch eine Schwellwertbildung voneinander getrennt werden. Diese Vorgehensweise der Trennung wird als schwellwertbasierte Segmentierung bezeichnet [68]. Bei dieser Operation werden verschiedene Regionen mit spezifischen Eigenschaften in einem Bild in Klassen unterteilt. So können, wie in Abbildung 2.9 am Beispiel eines zweiphasigen Stahlgefüges gezeigt, ferritische Bereiche nach einer Beraha-Ätzung von kohlenstoffreichen Bereichen getrennt werden. Es entsteht ein Binärbild, welches im Fall des zweiphasigen Gefüges die Informationen über die kohlenstoffreichen Bereiche (sog. Objekte) enthält.

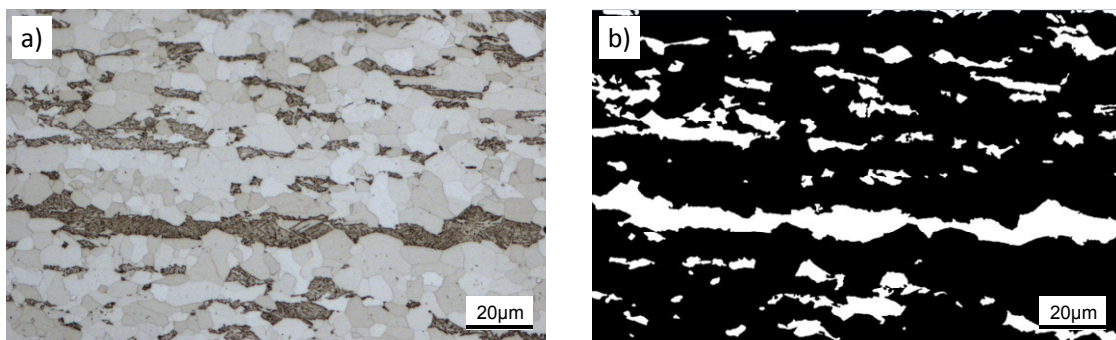


Abbildung 2.9: Schematische Darstellung der Regionensegmentierung nach Schwellwert. Zweiphasiges Stahlgefüge mit ferritischen Bereichen und kohlenstoffreichen Bereichen nach einer Beraha Ätzung a). Binärbild nach Schwellwertsegmentierung mit den Objekten der kohlenstoffreichen Bereiche in weiß b).

In modernen Bildanalyseprogrammen, wie AxioVision, A4i oder Fiji, sind Segmentierungsmethoden standardmäßig implementiert [66],[69],[70]. Die Programme erlauben zusätzlich zu diesen Operationen quantitative Auswertungen von Merkmalen der entstandenen binären Objekte, wie z.B. Morphologie, Anteile und Verteilungen (Abbildung 2.10). Für die Klassifizierung ist vor allem die Auswertung von Form- und Größenparametern (sog. morphologische Parameter) der segmentierten Bildobjekte interessant.

Diese Merkmale können berechnet werden, indem beispielsweise für die Fläche des Objektes die Anzahl der weißen Pixel aufsummiert wird. Durch die Kalibrierung und das Wissen über die Dimension eines Pixels einer Mikroskopaufnahme ist es möglich die reale Fläche des Objektes zu berechnen.

Neben der Fläche sind in den verschiedenen Bildverarbeitungsprogrammen eine Vielzahl an unterschiedlichen Parametern (Umfang, Durchmesser, etc.) implementiert. In Abbildung 2.10 sind beispielhaft die morphologischen Parameter Fläche, Umfang konvexer Umfang und maximaler Feret-Durchmesser schematisch für ein Objekt gezeigt.

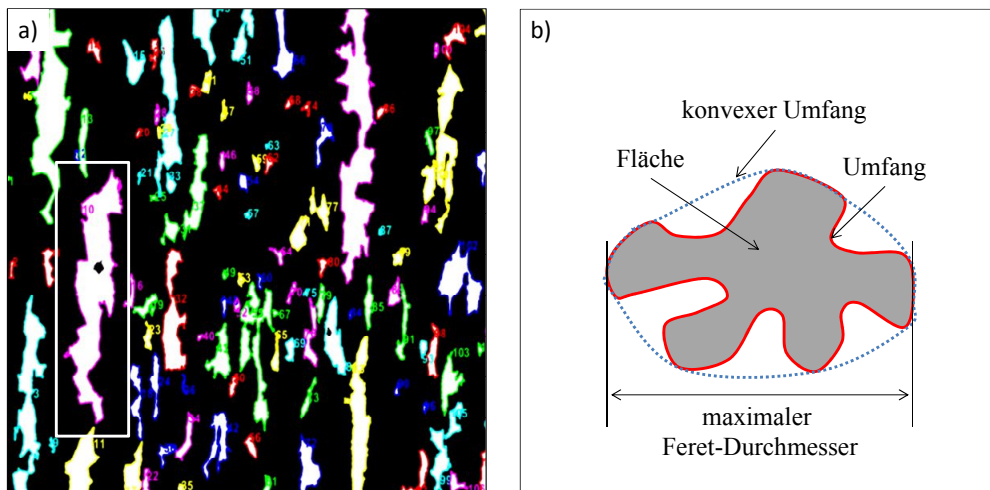


Abbildung 2.10: Segmentierte LIM1-Aufnahme auf welcher die Objekte detektiert und nummeriert sind a) und schematische Darstellung typischer morphologischer Parameter (Fläche, konvexer Umfang, Umfang, maximaler Feret-Durchmesser) für ein Bildobjekt b).

Aus diesen Messgrößen können weitere Merkmale berechnet werden, welche beispielsweise die Rundheit oder das Aspektverhältnis von Bildobjekten beschreiben können, wie in Tabelle 2.1 für einige Beispiele gezeigt [55],[71]. Bei diesen Merkmalen wird die Ähnlichkeit der Objekte zu einem perfekten Kreis analysiert. Ein Wert von 1 wird angenommen, wenn das Objekt perfekt kreisförmig ist. Je näher der Wert bei 0 liegt, desto unregelmäßiger ist das Objekt.

Tabelle 2.1: Mathematische Beschreibung der formbasierten Merkmale Aspektverhältnis, Kompaktheit, Konvexität, Zirkularität, Rundheit und Sphärizität [66],[69],[70],[72],[73].

Name	Formel	Beschreibung
Aspektverhältnis	$\frac{D_{min}}{D_{max}} = \frac{minFeret}{maxFeret}$	Verhältnis zwischen dem minimalen (<i>minFeret</i>) und maximalen Feret-Durchmesser (<i>maxFeret</i>) des Objekts.
Kompaktheit	$\frac{A}{A(U_{konv})} = \frac{4\pi * A}{(U_{konv})^2}$	Verhältnis zwischen der Objektfläche (A) und der Fläche des Kreises mit dem gleichen Umfang wie der konvexe Umfang des Objekts A(<i>Ukonv</i>).
Konvexität	$\left(\frac{U_{konv}}{U}\right)^2$	Quadratisches Verhältnis zwischen dem konvexen Umfang (<i>Ukonv</i>) des Objekts und seinem Umfang (U).
Zirkularität	$\frac{D(K)}{max\ Feret} = \sqrt{\frac{4 * A}{\pi * (max\ Feret)^2}}$	Verhältnis zwischen dem Durchmesser des Kreises (D(K)) mit der gleichen Fläche wie die Objektfläche (A) und dem maximalen Feret-Durchmesser des Objekts (<i>maxFeret</i>).
Rundheit	$\frac{A}{A(K)} = \frac{4 * A}{\pi * (max\ Feret)^2}$	Verhältnis zwischen Objektfläche (A) und der Fläche des umschriebenen Kreises (A(K)).
Sphärizität	$\frac{A}{A(U)} = \frac{4\pi * A}{(U)^2}$	Verhältnis zwischen der Objektfläche (A) und der Fläche des Kreises (A(U)) mit dem gleichen Umfang wie der Umfang des Objekts (U).

Ein genereller Nachteil der Binärbilder ist, dass die Information über die Bildtextur der segmentierten Bereiche verloren geht. Bei Stahl im Besonderen ist jedoch die Ausbildung der Substruktur innerhalb der Phasenobjekte entscheidend für die Unterscheidung der Gefügebestandteile (Kapitel 2.1). Diese Informationen können nur aus der Bildtextur der originalen Mikroskopaufnahmen ausgelesen werden. Die Bildtextur ist die räumliche Verteilung der Grautöne innerhalb eines Bildes oder Bildbereiches [74]. Für den Menschen ist es meistens intuitiv möglich, Texturmuster qualitativ als fein, grob, ausgerichtet oder unregelmäßig zu erkennen und zu beschreiben. Für die Bildanalyse ist eine präzise Texturanalyse eine große Herausforderung, da diese eine hohe Abhängigkeit von einer Vielzahl von Einflussparametern, wie beispielsweise der Qualität der Aufnahme und die Vorverarbeitung der Aufnahme als auch die Präparation und Kontrastierung der Proben, zeigt. Die Ansätze zur Analyse der Bildtextur sind sehr vielfältig und unterscheiden sich hauptsächlich durch die Methode zur Extraktion der Texturmerkmale. Texturbasierte Bildmerkmale nutzen pixelbasierte Informationen definierter Bereiche, z.B. Grauwertverteilungen oder Histogramme, um die Bildtextur der Bildbereiche zu beschreiben.

In den Materialwissenschaften werden zur digitalen Bilderverarbeitung verschiedene pixelbasierte Merkmale wie z.B. Local Binary Patterns (LBP) [75], das Auswerten von Grauwert-Histogrammen oder einer Grauwertematrix nach Haralick [76] (engl. Gray-Level Co-Occurrence Matrix, GLCM) bereits heute zur Texturerkennung eingesetzt [77]. Diese Verfahren beruhen im Grundsatz auf der Auswertung von Grauwerten benachbarter Pixel.

In der vorliegenden Arbeit werden die von Haralick entwickelten GLCM-Parameter genutzt. Diese basieren auf der Annahme, dass die Texturinformationen auf einem Bild durch den räumlichen Zusammenhang zwischen den Pixelgrautönen dargestellt werden kann [76]. Aus diesem Grund wird eine GLCM konstruiert, bei der jedes Element das Verhältnis des Grauwertes zwischen einem Pixel und seinem Nachbarn in einer bestimmten Richtung und Entfernung darstellt. Standardmäßig ist die Richtung als 0° definiert (bezogen auf die direkte Pixelumgebung in horizontaler Richtung des Bildes), aber auch die 90°-Richtung und eine diagonale Berechnung der Pixelpaarungen sind möglich (45° und 135°). In der GLCM ist die Häufigkeit der Kombinationen dieser ermittelten Pixelhelligkeitswerte enthalten. Es ergibt sich eine quadratische Matrix mit NxN-Elementen, wobei N die Anzahl der Graustufen im Bild ist (z.B. 256x256 bei einem 8-bit-Grauwertbild). Aus dieser Matrix können unterschiedliche Bildtexturmerkmale (z.B. Korrelation [78], Kontrast [76], Energie und Homogenität [79], Tabelle 2.2) berechnet werden. Diese Parameter sind in der MATLAB®-Software implementiert.

Tabelle 2.2: Formel und Erklärung der Parameter Korrelation, Kontrast, Energie und Homogenität, die aus der GLCM berechnet werden können. N ist die Anzahl der Grauwerte im Bild, P(i,j) die normierte Wahrscheinlichkeit von Pixelpaarungen mit den Grauwerten i und j, μ_x und μ_y sind die Mittelwerte jeder Zeile bzw. Spalte der GLCM und σ_x und σ_y ihre jeweilige Standardabweichung [76],[78],[79].

Name	Formel	Erklärung
Kontrast	$\sum_{n=0}^{N-1} n^2 (\sum_{ i-j =n} P(i,j))$	Maß für die lokale Variation des Grauwertes in einem Bild.
Korrelation	$\sum_i \sum_j \frac{P(i,j) [(i - \mu_x) \cdot (j - \mu_y)]}{\sigma_x \sigma_y}$	Maß für die lineare Grauwertabhängigkeit zwischen Pixeln einer definierten Position relativ zueinander.
Energie	$\sum_i \sum_j P(i,j)^2$	Maß für die Gleichmäßigkeit der Grauwertverteilung in einem Bild.
Homogenität	$\sum_i \sum_j \frac{P(i,j)}{1 + i - j }$	Kann als eine Umkehrung des Kontrasts eines Bildes beschrieben werden, da nur Einträge nahe der Diagonalen einen großen Einfluss haben.

Zusammenfassung

Die beschriebenen Methoden der quantitativen Gefügeanalyse können nach angepasster Ätzung verwendet werden, um vielfältige Merkmalsdaten über Bildobjekte aus mikroskopischen Aufnahmen auszuwerten. Der in Britz et al. entwickelte Arbeitsablauf ermöglicht hierzu eine objektbezogene, automatische Extraktion und Analyse von einzelnen Bildobjekten korrelierter Aufnahmen [36]. Die Vielzahl an auslesbaren Merkmalsdaten und deren Kombinationsmöglichkeiten bringt Experten an die Grenzen der Interpretierbarkeit, da keine Abgrenzung der Merkmale aufgrund von Schwellwerten möglich ist und oftmals eine Vielzahl an Merkmalen genutzt werden muss, um Gefügebestandteile voneinander zu unterscheiden [80]. Zusätzlich stellt die Zusammenführung der Merkmale aus unterschiedlichen Programmen der quantitativen Gefügeanalyse (wie z.B. den Bildanalyseprogrammen AxioVision, A4i oder Fiji [66],[69],[70]) und von verschiedenen Messungen (z.B. LIM, REM, EBSD) eine große Herausforderung dar, da in den meisten Fällen keine Automatisierung existiert. Je nachdem welche Merkmale benötigt werden, müssen unterschiedliche Programme und Messmethoden verwendet werden. Dies führt zu einem großen Zeitaufwand bei der Zusammenführung von Ergebnissen und bei der Erstellung von Merkmalsdatenbanken.

2.3 Traditionelle Klassifizierung von Stählen

In Kapitel 2.1 wird deutlich, dass eine große Vielfalt an Gefügebestandteilen für den Werkstoff Stahl durch die Variation von verschiedensten Prozessparametern entstehen kann. Für die Weiterentwicklung der heutigen Stahlsorten ist es notwendig, Stähle und ihre Gefüge systematisch klassifizieren zu können. Traditionell werden Stähle mit einer Vielzahl unterschiedlicher Klassifizierungssysteme basierend auf der Zusammensetzung, dem Gefüge, der Anwendung oder der Spezifikation eingeteilt [25]. Abbildung 2.11 zeigt einen generellen Überblick über die zwei hauptsächlich genutzten Wege in der Stahlklassifizierung. Auf der linken Seite erfolgt die Klassifizierung nach dem Handelsnamen oder ihrer Anwendung und auf der rechten Seite nach den Gefügebestandteilen.

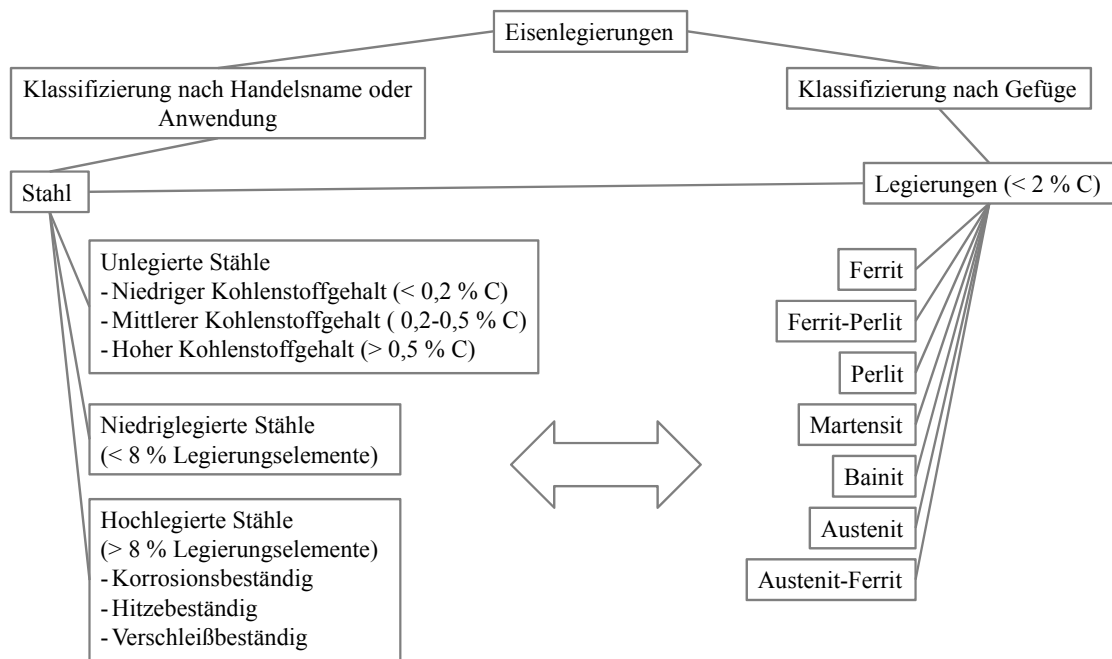


Abbildung 2.11: Überblick über die zwei hauptsächlich genutzten Wege in der Stahlklassifizierung (modifiziert nach [25]).

Die einfachste Methode der Klassifizierung verschiedener Stähle ist eine Unterteilung nach chemischer Zusammensetzung der Legierung. Da weltweit kein einheitliches Klassifizierungssystem existiert, haben viele Nationen ihre eigenen Systeme. In der europäischen Norm für Stahlwerkstoffe wird eine vollständige Erfassung und Klassifizierung aller Stähle in der DIN EN 10020 und DIN EN 10027 zusammengefasst. Daneben gibt es für

einzelne Stahlsortengruppen zahlreiche Sonderbezeichnungen. In den Normen wird einerseits nach Legierungsarten, aber auch nach Verwendung kategorisiert. Das in den Vereinigten Staaten am weitesten verbreitete Klassifizierungssystem ist das des Amerikanischen Eisen- und Stahl-Institutes (American Iron and Steel Institute, AISI) und der Gesellschaft der Automobilingenieure (Society of Automotive Engineers, SAE), welches auf der Zusammensetzung beruht und auf unlegierte und niedriglegierte Stähle ausgelegt ist. Das System der Amerikanischen Gesellschaft für Prüfung und Materialien (American Society for Testing and Materials, ASTM) basiert auf der Zusammensetzung, den mechanischen Eigenschaften und anderen Charakteristiken in Kombination mit den Anwendungsfeldern. Ein System, das alle amerikanischen Systeme vereint, allerdings selten genutzt wird, ist das einheitliche Nummerierungssystem (Unified Numbering System, UNS) mit neuer Nomenklatur [25].

Für eine gefügebasierte Klassifizierung ist im Gegensatz dazu eine Unterscheidung aufgrund der auftretenden Gefügebestandteile, wie in Abbildung 2.11 rechts gezeigt, notwendig. Das Hauptproblem der Klassifizierung von Gefügebestandteilen besteht darin, dass kein endgültiges und einheitliches Klassifizierungssystem mit eindeutiger Definition der Bestandteile verfügbar ist. Es gibt verschiedene Klassifizierungssysteme, deren Definitionen sich ergänzen und sich überschneiden. Die Klassifizierung in allen Systemen beruht auf der subjektiven Beurteilung geätzter Gefügebestandteile durch Experten auf der Basis von LIMI-, REM- und TEM-Aufnahmen [50],[35],[81]. Eine besondere Herausforderung ist die Unterscheidung verschiedener Ferrit- und Bainitarten. Aus diesem Grund findet sich eine Vielzahl an Klassifizierungssystemen für diese Gefüge. Moderne Ansätze nutzen vermehrt zu den mikroskopischen Aufnahmen kristallographische Orientierungsinformationen aus EBSD zur Identifizierung und Quantifizierung von Bainit, Martensit und verschiedenen Ferritarten [61],[82],[83],[84]. Außerdem sind in den Systemen die Entstehungsmechanismen der Bestandteile unter der Nutzung von Prozessinformationen als Entscheidungskriterium hinzugefügt. Um einen Überblick über die Vielfalt der Systeme zu geben, werden im Folgenden die gängigen Klassifizierungssysteme für Stähle auf Basis des Gefüges vorgestellt.

2.3.1 Gefügebasierte Klassifizierung von Stählen

Zwei grundlegende Klassifizierungssysteme bilden die Basis für alle weiteren in dem Kapitel beschriebenen Systeme. Zum einen handelt es sich um das IIW-Schema des Internationalen Institutes für Schweißtechnik (engl. International Institute of Welding) und zum anderen um das ISIJ-Schema (Atlas für Bainitische Gefüge) des Bainit Komitees der Japanischen Eisen- und Stahl Institutes (engl. Bainite Committee of the Japanese Iron and Steel Institute) [85],[86],[87]. Das IWW-Klassifizierungsschema umfasst Gefüge, die in der Schweißnaht und in der thermischen Einflusszone beim Abkühlen aus dem unverformten Austenit gebildet werden. Die Gefügebestandteile werden in Hauptkomponenten und in Zweitphasekomponenten unterteilt und wie in Tabelle 2.4 mit Buchstabenkürzeln gekennzeichnet. Die Entstehung der Komponenten durch diffusionsgesteuerte oder displazive Umwandlung wird ebenfalls betrachtet. Der Klassifizierungsansatz im IIW-Schema ist nicht für Gefüge ausgelegt, die nach der thermomechanischen Behandlung entstehen. Das ISIJ-Schema für bainitische Gefügestrukturen basiert ebenfalls auf einem zweistufigen System, in welchem zunächst die Hauptphase (verschiedene Ferrit-Bainitarten) und dann nach der Zweitphase bzw. den Gefügekomponenten (Zementit, MA, usw.) klassifiziert wird, wie in Tabelle 2.3 gezeigt [88]. Beide Systeme basieren auf dem Einsatz von optischen Mikroskopen.

Tabelle 2.3: Symbole und Nomenklatur des ISIJ-Klassifizierungssystems (modifiziert nach [88]).

Matrix Hauptphase		Untergeordnete Zweitphase	
Nomenklatur	Symbol	Nomenklatur	Symbol
Polygonaler Ferrit	α_p	Restaustenit	γ_r
Quasipolygonaler Ferrit	α_q	Martensit-Austenit Bestandteil	MA
Widmanstätten Ferrit	α_w	Martensit	$\alpha'M$
Granularer Bainit	α_B	Selbstangellassener Martensit	aTM
Bainitischer Ferrit	α^o_B	BII, B2; Oberer Bainit, B _U : Oberer Bainit, B _L : Unterer Bainit	B
Martensit (engl. dislocated cubic martensite)	α'_m	Degenerierter Perlit	P'
		Perlit	P
		Zementit Partikel	Θ

Das Klassifizierungssystem von **Thewlis et al.**, das eine Weiterentwicklung des IIW-Schemas darstellt, bietet eine Basis zur Klassifizierung und Quantifizierung der ganzen Bandbreite an Gefügebestandteilen in unlegierten und niedriglegierten kohlenstoffarmen Stählen sowie von Schweißnähten und der Schweißwärmeeinflusszone [89]. In das System fließen neben der Morphologie Grundkenntnisse über die Entstehungsmechanismen (diffusiv / displaziv) der Gefügebestandteile ein. Zu den im IIW-Schema verwendeten Terminologien werden weitere Bestandteile hinzugefügt und in eine Tabelle mit Unterkategorien aufgenommen. Zusätzlich stehen Flussdiagramme mit Richtlinien zur Kennzeichnung der Hauptkomponenten zur Verfügung, die als Leitfaden eine Hilfestellung bei der Klassifizierung darstellen. Wie in der Tabelle 2.4 gezeigt, wird in die Hauptgefügebestandteile Ferrit, Perlit, Bainit und Martensit und deren Untergruppen unterteilt. Die Anwendung des Systems erfolgt über eine Beurteilung der LIMI-Aufnahmen anhand der Flussdiagramme durch trainierte Experten [89].

Tabelle 2.4: IWW-Klassifizierungssystem mit den Erweiterungen nach Thewlis et al. (modifiziert nach [89]).

Hauptstruktur Klassifizierung	Kategorie der Komponenten			Beschreibung
	Überall	Haupt	Sub	
Rekonstruierendes Umwandlungsverhalten (diffusionskontrolliert, mit kleinen Reaktionsraten)				
Ferrit	PF*	PG (GB)	PF(G)* PF(NA) PF(I)	Primärer Korngrenzen Ferrit, allotriomorpher Ferrit, polygonaler Ferrit Polygonaler primärer Ferrit nicht ausgerichtet Idiomorpher Ferrit
Perlit	P*	P*	FC(P)* FC*	Lamellarer Perlit, Degenerierter Perlit, Feinkolonie Perlit Ferrit-Karbid Aggregate
Kooperatives Umwandlungsverhalten (displaziv, mit hohen Reaktionsraten)				
Widmanstätten Ferrit	WF	WF(GB) WF(I)	FS(A)* FS(NA)* FS(I) FP(I) AF*	Widmanstätten Ferrit mit ausgerichteten Mikrophasen zwischen den Latten (GB), Widmanstätten Ferrit Seitenplatten Widmanstätten Ferrit mit nicht ausgerichteten Mikrophasen Intragranulärer Widmanstätten Ferrit, Ferrite Seitenplatten Intragranulärer Widmanstätten Ferrit, Ferrite Platten Widmanstätten azikularer Ferrit

Hauptstruktur Klassifizierung	Kategorie der Komponenten			Beschreibung
	Überall	Haupt	Sub	
Kooperatives Umwandlungsverhalten (displaziv, mit hohen Reaktionsraten)				
Bainit	B	B(GB)	FS(A)*	Bainitischer Ferrit mit ausgerichteten Karbiden
			FS(NA)*	Bainitischer Ferrit mit nicht ausgerichteten Karbiden
			FS(UB)*	Oberer Bainit
	B(I)		FS(LB)*	Untere Bainit
			FS(I)	Intragranuläre Bainit Bündel
			PF(I)	Intragranuläre Bainit Platten
			AF*	Bainitischer azikularer Ferrit
Martensit	M*	M*	M(L)*	Lattenmartensit
			M(T)*	Plattenmartensit
*Terminologien aus dem IIW- Klassifizierungsschema				

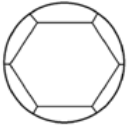


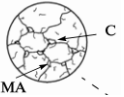
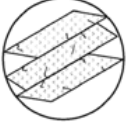
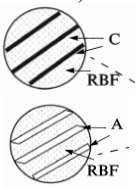
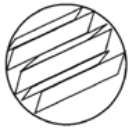
Das Klassifizierungssystem nach **Smirnov et al.** deckt die Gefügebestandteile von kohlenstoffarmen Linepipe-Stählen ab [90]. In dem Schema wird, wie in den vorher beschriebenen Systemen, sowohl der Entstehungsmechanismus der Komponenten durch diffusionsgesteuerte und displazive Umwandlung, als auch die Morphologie der Hauptstrukturelemente betrachtet. Es werden LIM- und TEM-Aufnahmen für die Klassifizierung genutzt (Tabelle 2.5).

Tabelle 2.5: Klassifizierungssystem nach Smirnov et al. für niedrigkohlige Linepipe-Stähle (modifiziert nach [90]).

Mechanismus	Strukturkomponente
Diffusion	Polygonaler (equiaxialer) Ferrit
	Allotriomorpher (Korngrenzen) Ferrit
	Quasipolygonaler (massiver) Ferrit
	Lamellarer Perlit
	Degenerierter Perlit
	Widmanstätten Ferrit
Displaziv	Azikularer Bainit
	Lattenbainit
	Globularer (Körniger) Bainit
	Lattenmartensit
	Plattenmartensit

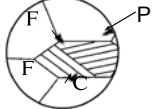
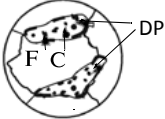
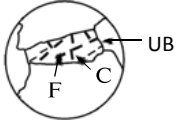
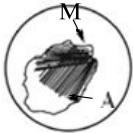
Matrosov et al. schlagen ein Klassifizierungsschema für kohlenstoffarme niedriglegierte Stähle mit einigen Verfeinerungen vor, das auf dem Ansatz des ISIJ-Systems basiert [91]. Verschiedenen Phasen und Gefügebestandteile, die aus dem unterkühlten Austenit entstehen können, sind zusammengefasst in Tabelle 2.6 und Tabelle 2.7 gezeigt.

Tabelle 2.6: Klassifizierungssystem für die kohlenstoffarme Phase nach Matrosov et al. für kohlenstoffarme niedriglegierte Stähle (modifiziert nach [91]).

Kohlenstoffarme Phasen		Kohlenstoffreiche Phase	Beschreibung
Polygonaler Ferrit (PF)			Diffusion (> 650 °C), Äquiaxiale Körner, niedrige Versetzungsdichte (< 10 ⁷ cm ⁻²), hauptsächlich Großwinkelkorngrenzen
Quasi-polygonaler Ferrit (QPF)			Diffusion + Displaziv (580 - 620 °C), kleinere Kristalle + höhere Versetzungsdichte als PF, gekümmte hauptsächlich Großwinkelkorngrenzen, leichte Substruktur in den Körnern
Granularer bainitischer Ferrit (GBF)		Partikel (Fe ₃ C + MA-Phase in der granularen Bainit Struktur) 	Äquiaxiale oder irreguläre Blöcke/Pakete, die signifikant kleiner sind als das Austenitkorn, verschiedene Kurdjumov-Zacks (K-Z) Orientierungen, signifikant höhere Versetzungsdichte als PF
bainitischer Platten Ferrit (RBF) (engl. rack bainitic ferrite)		Filme (Fe ₃ C + Restaustenit in den Platten Strukturen) 	Platten mit unterschiedlicher Breite und Substruktur, durch Kleinwinkelkorngrenzen getrennt, Pakete aus Platten getrennt durch Großwinkelkorngrenzen, Versetzungsdichte ist größer als bei QPF, azikulare Form
Platten Martensit (M) (engl. rack martensite)			Martensit Transformation, Morphologie ist ähnliche zum unteren Bainit LB aber höhere Versetzungsdichte und schmalere Plattenbreite (0.2 - 0.3 µm), keine unterschiedlichen K-Z-Orientierungen, Pakete aus Platte

Die Morphologie der Ferritmatrix, die den größten Teil des Volumens einnimmt, wird separat beschrieben. Nach der Matrixklassifizierung wird die Art und die Morphologie der mit Kohlenstoff angereicherten inselartigen Komponenten (in der Regel weniger als 10 %) und die Morphologie und Zusammensetzung der Einschlüsse definiert. In der vorgeschlagenen Klassifizierung sind die kohlenstoffreichen Bereiche als inselförmige Strukturen charakterisiert. Diese unterscheiden sich von der kohlenstoffarmen Ferritmatrix. Der Abstand zwischen den inselförmigen Bereichen ist hierbei um ein Vielfaches größer als die Größe des Matrixstrukturelements (Ferritkorngröße). In diesem Schema gibt es keine Orientierungsbeziehung zwischen kohlenstoffreichen und den angrenzenden kohlenstoffarmen Bereichen. Wenn kohlenstoffreiche Filme zwischen oder in den Körnern beobachtet werden, deren Abstand kleiner als das Matrixstrukturelement ist, werden die Strukturen unter bestimmten Annahmen als Bainit klassifiziert.

Tabelle 2.7: Klassifizierungssystem für die kohlenstoffreiche Phase mit inselförmiger Struktur nach Matrosov et al. für kohlenstoffarme niedriglegierte Stähle (modifiziert nach [91]).

Kohlenstoffreiche Phase - Inselförmige Strukturen	Beschreibung	
Perlit (P)		Diffusion (600 - 620 °C) mit kleiner Abkühlrate (< 5 °C/s), Perlit-Kolonien aus eutektoider Mischung aus α -Phase + dünnen parallelen Fe_3C -Platten
Degenerierter Perlit (DP)		Bei nicht ausreichenden Diffusionszeiten, runde Zementiteinschlüsse in Ferritkörnern, langgestreckte Einschlüsse an den KG
Oberer Bainit (UB) (engl. upper bainite)		Diffusion + Displaziv (580 - 620 °C), α -Phase + Fe_3C -Platten, Bainitbereiche, äquial axial bei Temp. ↓ + langgezogen bei Temp. ↑, Fe_3C -Platten kleiner + stärker ausgerichtet (vgl. zu DP)
Unterer Bainit (LB) (engl. lower bainite)		Geringere Diffusion bei tieferen Temperaturen als UB, α -Phase und Fe_3C -Platten innerhalb der Ferritlatten
M/A Phase (Plattenmartensit M + Restaustenit A)		Austenit stabilisiert durch $C \uparrow$ + Legierungselement-Konzentration ↑, gewöhnlich 5 - 10 μm große Regionen, Volumenanteil 2 - 5 %, inselförmige Strukturen zwischen PF oder QPF

Ein weiteres umfangreiches Klassifizierungssystem für Komplexphasenstähle, das vom Aufbau dem ISIJ-System und dem System von Thewlis et al. [89] ähnelt, ist der sog. **Micro Quant**, der im Rahmen vorwettbewerblicher Arbeitskreise entstanden ist und von der EU gefördert wurde [38]. Enthalten ist ein Überblick über die Gefügebestandteile und deren morphologische und kristallographische Eigenschaften basierend auf LIM- und REM- und TEM-Aufnahmen in Kombination mit EBSD-Ergebnissen. Das entwickelte Schema teilt sich in die Beschreibung der Matrixphase und der Zweitphasen. Zunächst wird die Matrix klassifiziert, danach die Zweitphase und ebenfalls ihre Form und räumliche Verteilung berücksichtigt. Falls Karbide vorhanden sind, werden der Ausscheidungsstatus und die Dichte festgehalten, wie in Tabelle 2.8 gezeigt.

Tabelle 2.8: Übersicht über die Gefügebestandteile des Micro Quant Klassifizierungsschemas für Komplexphasenstähle (modifiziert nach [38]).

Matrixphase	Zweitphase			Ausscheidungs- härtende Karbide			
	Verteilung	Form	Typ	Typ	Dichte		
Polygonaler Ferrit	(i) Keine Zweitphase	Runde Partikel	ε-Karbide	Keine	Niedrig		
Quasipolygonaler Ferrit			Zementit				
Massiver Ferrit			Lamelarer/ degenerierter Perlit				
Perlit		Langgestreckte Partikel	Restaustenit				
Widmanstätten Ferrit		Filmartig	Martensit/Austenit Bestandteile				
Azikularer Ferrit			Produkte unvollständiger Umwandlung				
Granularer bainitischer Ferrit			Karbidfreier Bainit				
Lattenartiger bainitischer Ferrit		(ii) Zwischen den Körnern/ Latten	Diskrete Inseln			ε-Cu	Hoch
Lattenmartensit			Körner			Oberer/ degenerierter oberer Bainit	
Plattenamrtensit						Unterer/ degenerierter unterer Bainit	
Deformierter Ferrit		(iii) Innerhalb der Körner/ Latten	Blockartige Regionen			Martensit:strukturlos, strukturiert/(selbst-) angelassen	Sehr hoch

Die Beurteilung der Matrixbestandteile, Tabelle 2.9, erfolgt über die morphologischen Merkmale aus LIM- und REM-Aufnahmen in Kombination mit kristallographischen Eigenschaften aus EBSD-Messungen nach Einschätzung des Experten. Außerdem wird in diffusionsgesteuertes, kooperatives und verformendes Verhalten unterschieden.

Tabelle 2.9: Micro Quant Klassifizierungsschema für die Matrixbestandteile von Komplexphasenstähle (modifiziert nach [38]).

Matrix Bestandteile		Morphologie LIM/ SEM	EBSD	Anmerkungen	
Rekonstruierendes / diffusionsgesteuertes Umwandlungsverhalten					
Ferrit	Polygonaler Ferrit	α_P	Gleichachsig, polyedrisch geformt, ehemaligen γ -KG überlagernd	Keine Substruktur, Versetzungsdichte \downarrow , IQ \uparrow , KAM \downarrow	
	Quasi-polygonaler (erholter) Ferrit	α_Q	Irreguläre, wechselnde Formgebung, die ehemaligen Austenit-Korngrenzen überlagernd	Größtenteils erholt mit Substruktur. IQ \uparrow , KAM \uparrow	Bildet sich bei niedrigeren Temperatur als α_P
	Massiver Ferrit	α_M	Grober Ferrit in sehr niedrig C-haltigen Stählen mit der gleichen Zusammensetzung wie die austenitischen Phase	Kann hohe Versetzungsdichten und Sub-KG enthalten	Kein herausdiffundieren des C, kann M/A enthalten
Perlit	Lamellarer Perlit	P_L	Kooperatives Wachstum von Ferrit und Zementit		Keine Matrixphase in Mehrphasenstählen
	Degenerierter Perlit	P_D			
	Feine Perlit-Kolonien	P_F			
Scherendes / kooperatives Umwandlungsverhalten					
Bainitischer Ferrit	Widmannstatten Ferrit	α_W	Grobkörnige, gestreckte Platten	Kein Hinweis auf Substrukturen, IQ \uparrow , KAM \downarrow	Keimbildung an Austenit-KG oder α_P in allotriomorpher Form
	Nadel-förmiger ("acicular") Ferrit	α_A	Kleine Formen, spitz zulaufend, ineinander verzahnte Struktur, innerhalb der Austenit-Körner	Unterschiedliche Ferritkristallvarianten	
	Bainitischer Ferrit - granular	$\alpha_{B/G}$	Teilweise erholt, weniger lattenartig, ehemalige γ -KG bleiben erkennbar	Versetzungsdichten \uparrow , IQ \downarrow , KAM \uparrow	Angrenzend an "granulare" Zweitphasen
	Bainitischer Ferrit - lattenartig	α_B	Lattenartig, in Bündeln auftretend, ehemalige γ -KG bleiben erkennbar	Versetzungsdichten \uparrow , IQ \downarrow , KAM \uparrow	
Martensit	Latten-martensit	α'_L	Mit Versetzungen, bei niedrigen/mittleren C-Gehalten	IQ $\downarrow\downarrow$	Lattenartig, α'_T und α'_L unterscheidbar mittels TEM
	Platten-martensit	α'_T	Zwillingsmechanismus, bei höheren C-Gehalten	IQ $\downarrow\downarrow$	
Verformendes Verhalten					
	Deformierter Ferrit	α_D	Langgezogene Körner mit Scherbändern	Versetzungsdichte \uparrow , IQ \downarrow , KAM \uparrow	

Tabelle 2.10: Micro Quant Klassifizierungsschema für die Zweitphasebestandteile von Komplexphasenstähle (modifiziert nach [38]).

Zweitphase	Unterscheidung		Morphologie LIM/REM	EBSD	Anmerkung
ϵ-Karbide		ϵ	Semi-kohärente Partikel in der Ferritmatri		Nur mit TEM identifizierbar
Zementit		Cem Fe_3C	Nichtkohärente Partikel	3 kristallogr. Orientierungsvarianten mit Ferrit	Kontrastierung durch Heiß-Ätzung mit Natrium-Picrat
Restaustenit		A	C-reicher Restaustenit, polygonal; glatt, ohne innere Struktur im LIM und REM	fcc XRD: Gitterkonstante ändert sich mit C-Gehalt	Mögliche Spuren der mechanischen Politur nach Nital-Ätzung oder elektrolytischer Politur
Martensitisch/austenitische Bestandteile		M/A	Inseln mit Martensit und Austenit	Kristallogr. Beziehung zwischen A und M	
Mixtur Produkte unvollständiger Umwandlungen		Mix	Felder aus Produkten unvollständiger Umwandlung		
Bainit	Karbidfreier	B_{C-free}	M/A-Inseln statt Zementit		
	Oberer	B_U	Zementit zwischen den Latten		Nicht-kooperatives Wachstum
	Unterer	B_L	Zementit innerhalb der Latten		Nicht-kooperatives Wachstum
Perlit	Lamellar	P_L	Eutektoides Umwandlungsprodukt		Kooperatives Wachstum
	Degeneriert	P_D	Unvollständiges eutektoides Umwandlungsprodukt		Kooperatives Wachstum
Martensit	Strukturlos	M_1	Ohne innere Struktur im LIM, leichte innere Struktur im REM	IQ und CI sehr niedrig, KAM sehr hoch	Hoher C-Gehalt
	Strukturiert	M_2	Mit inneren Strukturen im LIM	IQ und CI sehr niedrig, KAM sehr hoch	Niedriger C-Gehalt
	(Selbst-)/Angelassen	TM	Mit ϵ -Karbiden oder Zementit	IQ und CI niedrig, KAM hoch	Unterscheidbar von $M_{1/2}$ mittels TEM

Die enthaltene Zweitphase wird anhand ihrer Morphologie und Kristallographie unterschieden, wie in Tabelle 2.10 gezeigt.

Im Rahmen des Micro Quant Projektes kann kein zufriedenstellendes, allgemeingültiges Ergebnis zur reproduzierbaren und objektiven Gefügebeschreibung und -klassifizierung erzielt werden. Es wird deutlich, dass die Vergleichbarkeit der Ergebnisse bei der klassischen metallographischen Kontrastierung in unterschiedlichen Laboren mit unterschiedlichen Geräten und die subjektiven Bewertungen sehr große Herausforderungen darstellen.

2.3.2 Spezielle Systeme für bainitische und ferritische Strukturen

Aufgrund der Ähnlichkeiten und Unterschiede zwischen Bainit- und Ferritstrukturen findet sich in der Literatur eine Vielzahl an speziellen Klassifizierungssystemen. Die Gründe dafür liegen in den sehr feinen, komplexen Strukturen, in denen Bainit und Ferrit auftreten können. Eine Unterscheidung der Gefügebestandteile auf der Basis von mikroskopischen Aufnahmen reicht in vielen Fällen nicht mehr aus, sodass zusätzlich orientierungsbasierte EBSD-Daten als Entscheidungskriterium genutzt werden.

Ohmori et al. unterscheiden in ihrem Klassifizierungssystem drei Bainitklassen mittels LIM und TEM basierend auf dem isothermen Austenitzerfall [92]. Ferrit kann bei mittleren Transformationstemperaturen ohne Zementit auftreten. Dieser Ferrit und der Ferrit des oberen Bainit können in lattenartiger oder azikularer (engl. acicular, nadelförmig in der Fläche, im Raum linsenförmig) Morphologie auftreten (Tabelle 2.11).

Tabelle 2.11: Morphologien nach Ohmori et al. (modifiziert nach [92]).

Phase	Kriterien		
	Ferrit Morphologie	Verteilung der Karbide	
Ferrit	lattenförmig	Azikularer Ferrit (karbidfrei)	
Oberer Bainit	BI	karbidfreier azikularer Ferrit , filmartige MA-Regionen an den Lattengrenzen	Lattengrenze
	BII	karbidfreier azikularer Ferritlatten mit Zementit an den Lattengrenzen	
	BIII	azikularer Ferrit mit kleinen Zementitplättchen in den Latten (engl. "platelets")	
Unterer Bainit	plattenförmig	Im Korn	

Bramfitt und Speer teilen den Bainit in drei Hauptklassen mit Unterklassen abhängig von den auftauchenden Gefügebestandteilen auf [31]. Für die Unterscheidung werden LIMI- und TEM-Aufnahmen genutzt. Die erste Variante (B_1) besteht aus azikularem Ferrit mit Eisenkarbiden (z.B. Zementit oder Epsilon Karbiden) innerhalb der Platten. Die zweite Variante (B_2) zeigt Zementit, Austenit oder Martensit in Form von Partikeln oder Filmen an den Plattengrenzen des azikularen Ferrits. Die dritte Art (B_3) ist durch Austenit-, Martensit- oder Perlit-Bestandteile, welche als Inseln im azikularen Ferrit vorliegen, gekennzeichnet (Abbildung 2.12).

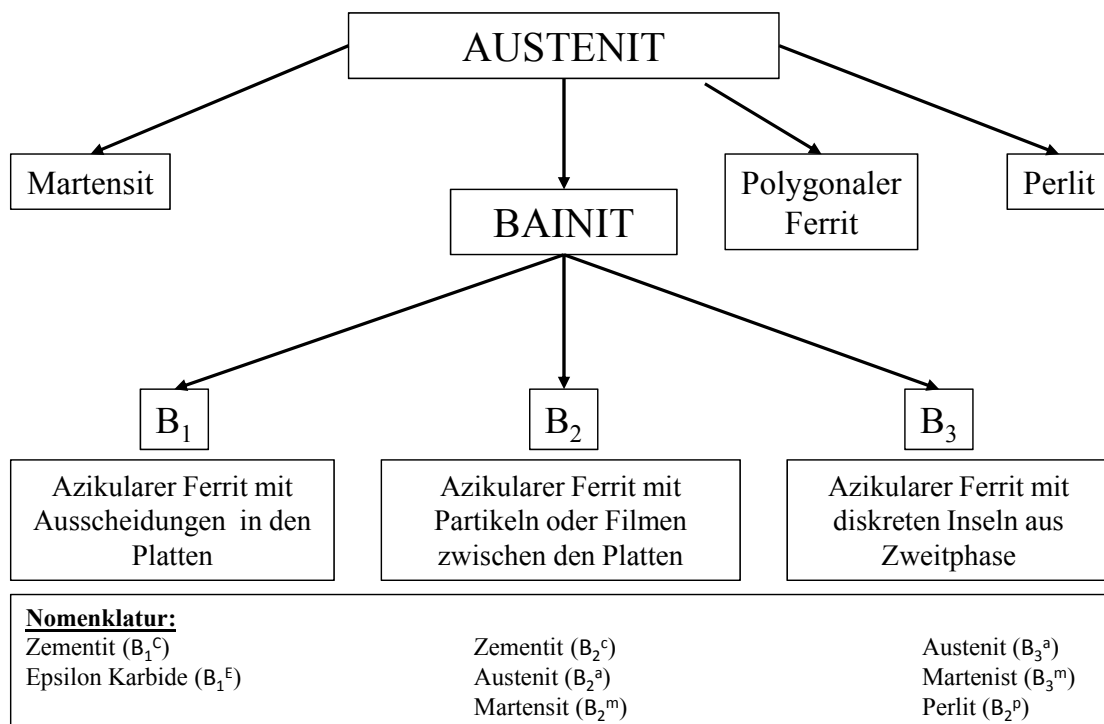


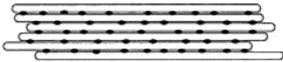

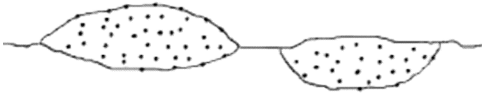
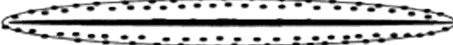


Abbildung 2.12: Klassifizierungsschema für Bainit anhand der auftretenden Morphologie und Gefügebestandteile nach Bramfitt und Speer (modifiziert nach [31]).

Abhängig von der chemischen Zusammensetzung und den Herstellungsbedingungen des Stahls ist es möglich, dass auf Mikroskopaufnahmen eine Kombination von zwei oder mehreren Bainitarten sichtbar ist.

Reynolds et al. gliedern Bainit auf Basis unterschiedlicher morphologischer Erscheinungsformen in sechs verschiedene Arten: Knotenförmiger Bainit, säulenförmiger Bainit entlang einer vorherigen Matrixkorngrenze, ein Bündel aus oberen Bainitlatten, unterer Bainit, allometrischer Korngrenzenbainit und inverser Bainit (Tabelle 2.12) [93],[94].

Tabelle 2.12: Schematische Darstellung der unterschiedlichen Bainitmorphologien nach Reynolds et al. für die sechs verschiedenen Bainitarten (modifiziert nach [93],[94]).

Bainit -Art	Morphologie
Knotenförmiger Bainit	
Säulenförmiger Bainit	
Oberer Bainit	
Unterer Bainit	
Korngrenzenbainit	
Inverser Bainit	

Lotter et al. unterteilen in einer Studie des VdeH die Bainitarten aufgrund der Erscheinungsform im Lichtmikroskop zunächst in drei Hauptgruppen: oberer, unterer und granularer Bainit. Es wird darauf hingewiesen, dass oberer und unterer Bainit im LIMi kaum voneinander getrennt werden können [95]. Anhand von beispielhaften LIMi-Aufnahmen wird in Strukturen mit durchgehenden Nadeln in gruppenweiser Anordnung und solche, die eine weniger ausgeprägte Nadelstruktur aufweisen, unterschieden. Letztere werden als körnig bezeichnet. Die Nadelstrukturen werden in feinnadelig, für Strukturen, in denen die

kohlenstoffreiche Phase von bainitischen Ferrit nur teilweise getrennt ist und in grobnadelig, bei Strukturen die getrennt werden können, unterschieden. Die Länge der Nadeln, und somit die Paketgröße des Bainits, bleibt bei dieser Klassifizierung unbeachtet.

Krauss und Thompson zeigen eine Zusammenfassung über fünf verschiedene Ferritarten, die in niedriglegierten Stählen auftreten können [32]. In ihrer Auflistung nutzen sie die Morphologie, die Versetzungsdichte und die Form der Korngrenzen als Unterscheidungskriterien (Tabelle 2.13).

Tabelle 2.13: Ferritmorphologien nach Krauss und Thompson (modifiziert nach [32]).

Bezeichnung	Morphologie
Polygonaler Ferrit oder äquiaxialer Ferrit	Äquiaxial geformt mit geringer Versetzungsdichte, keine Substrukturen, „glatte“ und durchgängige Korngrenzen
Widmanstätten Ferrit	Grobe, längliche, latten- oder plattenartige Ferritkristalle, wenige Versetzungs-Unterstrukturen
Quasi-polygonaler oder massiver Ferrit	Grobe Ferritkörner mit irregulären Korngrenzen, hohen Versetzungsdichten, Versetzungs-Subkorngrenzen und MA-Bestandteile
Bainitischer oder azikularer Ferrit	Morphologie ist feiner, Ferrit mit MA Bestandteilen, azikular geformte Gruppen parallel angeordneter Latten mit angrenzenden Zweitphasebereichen, (längliche, parallele Inseln), hohe Versetzungsdichten im Ferrit, Kleinwinkelkorngrenzen zwischen den Latten
Granularer Ferrit oder granularer bainitischer Ferrit	Feine Ferrit-Kristalle mit granularer oder äquiaxialer Form mit eingelagerten inselförmigen MA-Partikeln, Ferrit mit hoher Versetzungsdichte, Kristalle getrennt durch Kleinwinkelkorngrenzen

Das Bainit-Klassifizierungssystem für kohlenstoffarme Stähle von **Zajac et al.** basiert auf REM-Aufnahmen in Kombination mit EBSD-Messungen [33]. Es unterscheidet fünf Bainitarten, den granularen Bainit (GB), den oberen Bainit (UB) und den degenerierten oberen Bainit (DUB), den unteren Bainit (LB), den degenerierten unteren Bainit (DLB), deren Morphologien schematisch in Abbildung 2.13 a) bis e) gezeigt sind. Zusätzlich wurde noch selbstanglassener Lattenmartensit (LM) untersucht.

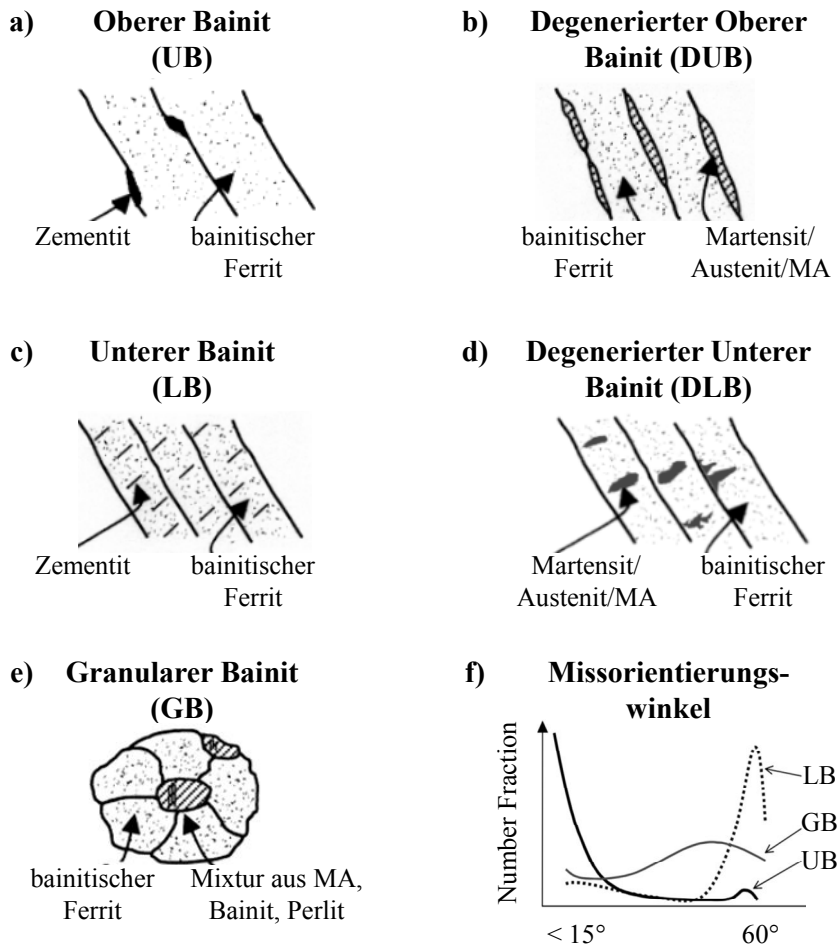


Abbildung 2.13: Verschiedene Bainitarten nach Zajac et al. für niedrigkohlige Stähle: oberer Bainit a), degenerierter oberer Bainit b), unterer Bainit c), degenerierter unterer Bainit d) und granularer Bainit e). Eine Unterscheidung der verschiedenen Bainitarten ist aufgrund der Missorientierungsverteilung der Korngrenzen möglich f) (modifiziert nach [33]).

Der Ferrit des GB ist irregulär mit inselförmigen Zweitphasebestandteilen. Die Zweitphase kann als degenerierter Perlit (P) oder Zementitanreicherungen, Bainite (B) oder eine Mischung aus unvollständigen Transformationsprodukten, MA oder Martensit (M) auftreten. Die Art und der Volumenanteil der Zweitphase ist abhängig von den Legierungselementen, dem Kohlenstoffgehalt sowie der Abkühlgeschwindigkeit und der Endkühltemperatur. Der UB zeigt eine lattenartige Ferritmorphologie mit Zementit an den Lattengrenzen, die in Paketen auftreten. Beim DUB finden sich an den Lattengrenzen MA-Bestandteile. Der LB zeigt eine plattenartige Morphologie mit Zementitpartikeln innerhalb der Platten, die ausgerichtet in einem Winkel von 60° entstehen. Beim DLB finden sich MA-Partikel statt Zementitpartikel

innerhalb der Platten. Der LM besitzt eine ähnlich Morphologie wie der LB, allerdings zeigen die Zementitpartikel keine Ausrichtung. Außerdem wird eine Abhängigkeit der Verteilung der Missorientierungswinkel bei EBSD-Messungen von der jeweiligen Bainitart beschrieben (Abbildung 2.13 f). Der LB hat hauptsächlich Korngrenzen mit Missorientierungswinkel von 50° bis 60°, der UB Winkel kleiner 20° und der GB eine zufällige Verteilung mit einem Peak bei 45°. Das entwickelte Klassifizierungssystem basiert auf einer Missorientierungsverteilung im bainitischen Ferrit in Kombination mit der Art der Zweitphase [33].

Gerdemann hat ein Klassifizierungssystem für bainitische Strukturen entwickelt, das ähnlich wie der ISIJ-Atlas und das System im Micro Quant die Haupt- und die Zweitphase(n) getrennt klassifiziert [96]. Es nutzt für die Beschreibung der Morphologie die Formparameter Rundheit (engl. roundness) und das Aspektverhältnis (engl. aspect ratio). Das System von Gerdemann ist von **Song** durch verschiedene Arten von Karbidtypen erweitert worden [97] (Tabelle 2.14).

Tabelle 2.14: Generelle Struktur des Klassifizierungsschemas nach Gerdemann und Song (modifiziert nach [96],[97]).

Hauptphase (Primary phase, P)		Zweitphase (Secondary phase, S)		
Kristallstruktur	Morphologie	Ort	Kristallstruktur	Morphologie
krz (BCC)	Polygonal ¹	Zwischen den Latten / KG (intergranular / Boundary)	hex (Karbide)	Rund ¹
			bct (Martensit)	Langgesteckt ² (Elongated)
			kfz (Austenit)	
	Quasi-polygonal ¹	In den Latten (intra-ganular)	keine (None)	Lattenförmig ²
			*Θ-Karbide	Filmartig ²
	Granular		*ε-Karbide	Gruppiert (Clustered)
	Widmanstätten		*η-Karbide	
	Azikular ²		*Cluster	
	Lattenförmig ²			
	*Plattenförmig			

*ergänzt nach Song

Definiert durch:

¹Rundheit (Unterschied zwischen der größten eingeschlossenen Ellipse und der kleinsten umschließenden Ellipse)

²Aspektverhältnis (Verhältnis von Länge zu Breite)

Zusammenfassung

Die Klassifizierung von Gefügebestandteilen einer neuen Gefügebildung erfolgt traditionell auf Basis einer subjektiven Bewertung durch einen Experten nach den im Kapitel 2.3 vorgestellten Schemata. Dies führt zu einem System, dessen Klassifizierungsergebnis vom Erfahrungshorizont des Benutzers abhängig ist. Die vorgestellten Klassifizierungssysteme zeigen ähnliche Tendenzen zur Benennung der Gefügebestandteile. Allerdings haben oftmals dieselben Bestandteile unterschiedliche Bezeichnungen. So kann der irreguläre Ferrit als bainitischer Ferrit oder nicht polygonaler Ferrit bezeichnet werden. Die nicht eindeutige Benennung derselben Bestandteile kann bei verschiedenen Experten bei der Anwendung der Klassifizierungssysteme zu Missverständnissen, falscher Kommunikation und zu einer Fehleinschätzung führen. Ringversuche zur Anwendbarkeit der Klassifizierungssysteme zeigen, dass eine Beurteilung von neuen Gefügen durch Experten aufgrund der Subjektivität zu sehr großen Abweichungen führt und die Ergebnisse nicht reproduzierbar sind [98],[99],[100],[101]. Aus diesem Grund ist es von großem Interesse, Methoden zu entwickeln, deren Entscheidungsfindung bei der Klassifizierung neuer mikroskopischer Aufnahmen nicht vom Wissen des Experten abhängig sind und welche jederzeit objektive und reproduzierbare Ergebnisse liefern.

2.4 Klassifizierung durch maschinelles Lernen

Die Werkzeuge der Informatik bieten neue Lösungsansätze für die Anwendung eines benutzerunabhängigen Klassifizierungssystems durch die Methoden des maschinellen Lernens. Klassifikation ist hierbei ein überwachtes Lernverfahren, das Daten verwendet, um Objekte Klassen zuzuordnen [102]. Das Wissen der Experten kann genutzt werden, um Gefügebestandteile auf mikroskopischen Aufnahmen vorzuklassifizieren und dieses Wissen z.B. in einem Modell abzubilden. Ein Vergleich des Klassifizierungsvorgangs nach traditioneller, manueller Methode und nach den computergestützten Methoden des maschinellen Lernens ist in Abbildung 2.14 schematisch dargestellt. Die Anwendung der Modelle und das Klassifizierungsergebnis sind unabhängig vom Benutzer und führen im Vergleich zu dem traditionellen Vorgehen zu einem objektiven Ergebnis.

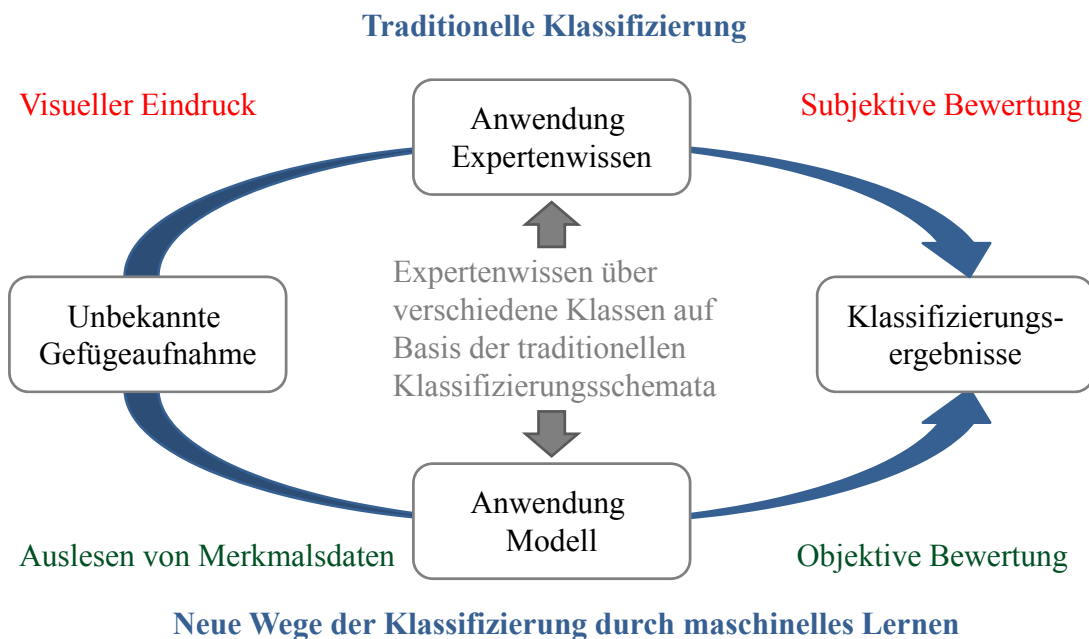


Abbildung 2.14: Schematische Darstellung der Klassifizierung einer unbekanntes Gefügeaufnahme nach dem traditionellen Weg der Gefügeklassifizierung mit subjektivem Klassifizierungsergebnis im Vergleich zu den neuen Wegen der Klassifizierung durch Erstellen eines Modells auf Basis der Methoden des maschinellen Lernens mit objektivem Klassifizierungsergebnis.

2.4.1 Grundlagen der Klassifizierung durch maschinelles Lernen

Methoden des maschinellen Lernens, die eine Modellbildung für Klassifizierungsprobleme erlauben, sind unter anderem Data Mining Methoden, die eine Überschneidung mit den klassischen Methoden des maschinellen Lernens (z.B. Entscheidungsbäume, einfache neuronale Netze) zeigen, und Deep Learning Methoden [103],[104].

Eine wichtige Voraussetzung zur Anwendung dieser Methoden im Bereich der Klassifizierung sind große Datenmengen (Merkmalsdaten), die definierten Klassen (z.B. Klasse 1 bis Klasse N) zugeordnet werden können (= vorklassifizierte Daten mit Klassenname 1 bis N, engl. labeled data, auch als Trainingsdaten bezeichnet). Für jede Klasse werden die gleichen Merkmalsdaten erfasst. Diese dienen als Grundlage für Klassifizierungsmodelle. Die Datenbasis ist eine Kombination aus der Anzahl der betrachteten Klassen und der Anzahl der Merkmale. Sie bildet die sog. Grundwahrheit (engl. ground truth) für die Klassifizierungsmodelle. Die Merkmale für die Klassen können z.B. aus mikrostrukturellen Charakterisierungstechniken stammen. Zu diesen Analysen zählen unter anderem Röntgenbeugung (XRD), magnetische und ultraschallbasierte Verfahren, mechanische Kennwerte oder Parameter aus der quantitativen Gefügeanalyse basierend auf mikroskopischen oder orientierungsbasierten Daten (LIMI, REM, EBSD). Mit allen Analysemethoden können Informationen über das Gefüge und einzelne Gefügebestandteile gesammelt und eine Datenbank erstellt werden, wie in Abbildung 2.15 gezeigt [35],[36],[37].

Neben den Merkmalsdaten ist der zweite entscheidende Punkt der Klassifizierungsalgorithmus. Diese Algorithmen nutzen im Allgemeinen die vorklassifizierten Merkmalsdaten, um Muster zu finden und damit ein bestimmtes Problem zu beschreiben. Im Bereich des maschinellen Lernens finden sich verschiedene Klassifizierungsalgorithmen (Klassifikatoren). Die Klassifizierungsalgorithmen basieren auf mathematischen Funktionen mit welchen z.B. Modelle erstellt werden können. Diese sind unter anderen z.B. einfache oder verschachtelte Entscheidungsbäume (engl. decision trees, DT; random forest, RF), einfache künstliche neuronale Netze oder das Stützvektorverfahren (engl. support vector machine, SVM). Es existieren zusätzlich Klassifikatoren, die kein Modell erstellen, wie z.B. die Methode der k-nächsten Nachbarn (kNN). In diesem Fall werden die Merkmalsdaten und Distanzmaße zur Klassifizierung neuer Datenpunkte genutzt [102].

Eine sehr erfolgreiche Methode des maschinellen Lernens für die Klassifizierung sind die Deep Learning Methoden. Diese sind Weiterentwicklungen der künstlichen neuronalen Netze, die im Vergleich zu einfachen Netzen zahlreiche verschachtelte Zwischenschichten (engl. hidden layers) zwischen Eingabeschicht und Ausgabeschicht haben (engl. convolutional neural network, CNN).

Die Bedingungen, um eine Klassifizierung mit den Methoden des maschinellen Lernen durchzuführen sind, zum einen eine geeignete vorklassifizierte Datenbasis (Merkmalsdaten) zur Verfügung zu haben und zum anderen einen passenden Klassifizierungsalgorithmus zu finden, wie in Abbildung 2.15 schematisch dargestellt [80],[105],[106].

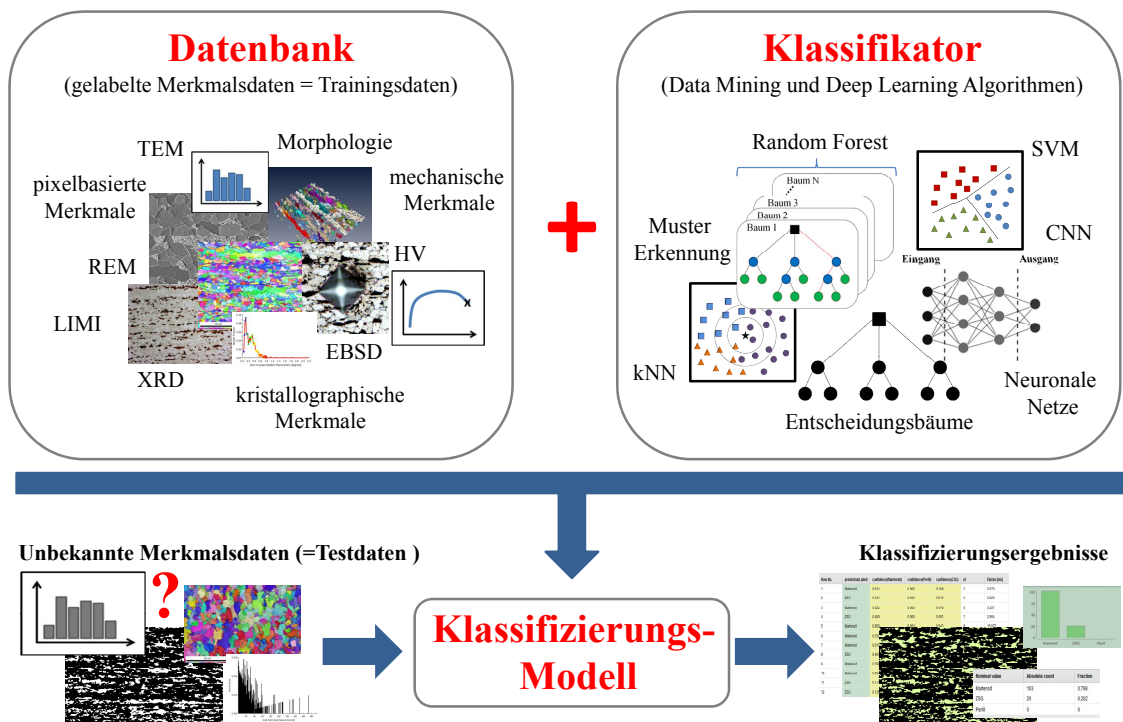


Abbildung 2.15: Schematische Darstellung des Aufbaus eines Klassifizierungsmodells basierend auf einer Datenbank mit vorklassifizierten Daten, welche aus unterschiedlichen Messungen gewonnen werden können und gängigen Klassifizierungsalgorithmen. Das final erstellte Modell kann neue unbekannte Testdaten in eine der vordefinierten Klassen einordnen.

Wenn ein Klassifikator genutzt wird, mit welchem ein Modell erstellt wird, erfolgt eine Anpassung des Modells an die vorklassifizierte Trainingsdaten im sog. Training. Hierzu werden zunächst in einem iterativen Prozess unterschiedliche Parameter des Klassifikators, die zu Beginn zufällig festgelegt werden, variiert und verschiedene Modelle erstellt. Dabei ist ein Modell durch eine feste Parameterkombination definiert. Die Modelle werden evaluiert, in dem sie mit den vorklassifizierten Merkmalsdaten getestet werden und die Ergebnisse mit der bekannten Referenz (engl. ground truth) verglichen werden. Die Abweichung des Modells zu der bekannten Referenz wird berechnet und dieser Schritt solange wiederholt und die Abweichung minimiert, bis keine weitere Verbesserung des Klassifizierungsergebnisses erzielt werden kann. Mit diesem finalen Modell können neue unbekannte Merkmalsdaten klassifiziert werden, in dem sie in eine der vordefinierten Klassen eingeordnet werden.

In der Stahlforschung werden vor allem die klassischen Methoden des maschinellen Lernens in einer Vielzahl von Anwendungen eingesetzt. Ein Großteil der Anwendungen finden sich im Bereich der Prozessführung, der Eigenschaftsvorhersage oder der Defekterkennung [107]. Für die genannten Anwendungsbereiche stehen große Datenmengen aus dem Herstellungsprozess und der Materialprüfung in Datenbanken zur Verfügung. Diese Daten begünstigen die Anwendung dieser Methoden [81],[108]-[118]. Zusätzlich wird bereits eine begrenzte Anzahl von Deep Learning Ansätzen für diese Bereiche eingesetzt. In diesen Ansätzen werden vortrainierte CNNs dazu verwendet, um Beziehungen zwischen Herstellungsbedingungen und dem Gefüge zu untersuchen oder werden zum Segmentieren verschiedener Gefügebestandteile verwendet [119],[120],[121],[122].

Im Bereich der Gefügeklassifizierung von Werkstoffen müssen Gefügaufnahmen (Aufnahmen mit Bildtextur) unterschiedlicher Gefügekassen zur Merkmalsextraktion zur Verfügung stehen. In diesem Bereich existieren bis heute jedoch keine vollständigen Bilddatenbanken. Generell existieren Bilddatenbanken wie Meastex oder Vistex, in welchen Aufnahmen mit unterschiedlicher Bildtextur gesammelt sind [123],[124],[125],[126]. Diese dienen vor allem zum Testen und Vergleichen von Bildtexturmerkmalen und zur Evaluierung von Klassifizierungsalgorithmen. Diesen Datenbanken enthalten beispielsweise synthetische Bilder (z.B. Fraktalflächen- und Gauß-Markov-Zufallsfeldbilder) und natürliche Bilder (z.B. Ledermuster und bemalte Oberflächen) [127]. Andere Anwendungsgebiete in der Klassifizierung von Bildtexturen finden sich im Bereich der militärischen Anwendung, der

Umweltforschung/-technik oder der Medizin [123],[127],[128],[129]. In diesen Anwendungen werden verschiedene Bodenbeläge aus Satellitenbildern, wie Asphalt, Beton, Gras und Fels, oder computertomographische Aufnahmen von unterschiedlichen Krankheitsstadien klassifiziert [123]. Für diese Anwendungsgebiete existiert im Vergleich zu Werkstoffgefügen eine Vielzahl an automatisch erfassten digitalen Aufnahmen, beispielsweise Satellitenbilder oder Ultraschall- und computertomographische Aufnahmen.

Im Bereich von Werkstoffgefügen, im Speziellen bei Stählen, sind wenige Bilddaten vorhanden. Ein erster Ansatz für die Erstellung einer Gefügedatenbank für Stähle ist die UHCSDB-Datenbank (engl. UltraHigh Carbon Steel Micrograph DataBase) für kohlenstoffreiche Stähle mit unterschiedlichen Wärmebehandlungen in welcher 961 REM-Gefügeaufnahmen gesammelt sind [130]. Eine Datenbank für die in der vorliegenden Arbeit verwendeten kohlenstoffarmen und niedriglegierten Stähle existiert in der Literatur noch nicht.

2.4.2 Methoden des maschinellen Lernens

Wie beschrieben können Methoden des maschinellen Lernens genutzt werden, um aus Merkmalsdaten von mikroskopischen Abbildungen Modelle zu erstellen, die ein übergeordnetes Wissen erzeugen. Generell bieten diese Methoden den Vorteil gegenüber den klassischen manuellen Klassifizierungsmethoden, dass das Klassifizierungsergebnis aus dem Modell nicht abhängig von der subjektiven Interpretation der Gefügebestandteile eines Experten ist [131]. Das Kapitel soll dazu dienen die Unterschiede zwischen den Data Mining Methoden, welche die klassischen Methoden des maschinellen Lernens nutzen, und den modernen Deep Learning Methoden darzustellen.

Bei der Anwendung der Data Mining Methoden werden, z.B. im Fall des Stützvektorverfahrens, in manuell ausgewählten Datenmengen mit bekannter Zuordnung (vorklassifizierte Merkmalsdaten) mit den Algorithmen neue Muster detektiert und ein numerisches Modell erzeugt [80],[105]. Die Methoden identifizieren gültige, neuartige, potenziell nützliche und verständliche Muster in den Merkmalsdaten und können somit Abhängigkeiten und Beziehungen zwischen den Merkmalen verschiedener Klassen feststellen. Das daraus erstellte Modell beinhaltet dieses neue, bisher in dieser Form nicht bekannte, Wissen. Es besteht die Möglichkeit vielschichtige Probleme zu lösen, die vorher

nicht gelöst werden konnten, da die Interpretierbarkeit aufgrund der Komplexität der Daten nicht möglich war. Beispielsweise können große Mengen an bestehenden Kundendaten für Banken oder für die Werbung mit diesen Methoden analysiert werden und das Kaufverhalten oder die Risikobereitschaft von Menschen anhand ihrer Daten abgeschätzt werden [132].

Die Merkmalerstellung (engl. feature engineering) ist bei Data Mining Prozessen ein manueller Vorgang und bildet die Basis für die Modelbildung. Die Sinnhaftigkeit der Merkmale und die Auswahl der Merkmale haben somit großen Einfluss auf die Qualität des Modells und müssen bei solchen Ansätzen unbedingt mit betrachtet werden.

Die komplexen Architekturen der Deep Learning Methoden in Form von CNNs beruhen auf dem Prinzip der Nachempfindung biologischer Neuronen. Dadurch ist es möglich komplexe intuitive Lernaufgaben nachzubilden, die sich nicht einfach mathematisch beschreiben lassen [133],[134]. CNNs sind eine wichtige Technologie beispielsweise beim autonomen Fahren. Sie ermöglichen es, Verkehrsschilder zu erkennen oder einen Menschen von einer Straßenlaterne zu unterscheiden. Weiterhin sind Sie zentraler Bestandteil für die Sprachsteuerung von Smartphones, Computern und Freisprecheinrichtungen.

Im Vergleich zu den Data Mining Methoden kann bei der Nutzung von hochvernetzten CNNs eine manuelle Auswahl der Merkmale entfallen. Die Rohdaten, welche Bilder, Texte oder akustische Daten sein können, können für den Aufbau der Modelle direkt vom Algorithmus verwendet werden. Besonders erfolgreich sind diese Methoden im Bereich der Bilderkennung. Durch die Analyse von bekannten Bildrohdaten, wie beispielsweise bei der Gesichtserkennung, können Systeme erstellt werden, deren Algorithmen die charakteristischen Merkmale aus Bildern extrahieren und Gesichter auf neuen Bildern wiedererkennen [135]. Hierfür suchen die Netze sich eigenständig Merkmale aus den zur Verfügung stehenden Informationen und verknüpfen diese auf verschiedenen Ebenen miteinander. Die Auswahl der Bildmerkmale kann im Training durch Transferfunktionen, Filter oder die Tiefe der Netze beeinflusst werden.

Der Erfolg der CNNs wird auf ihre Fähigkeit zurückgeführt, dass sie lernen, die abstrakten Qualitäten des Bildobjekts (z.B. Objektteile) in hierarchische Strukturen effektiv darzustellen. Sie setzen dazu Low-Level-Bildmerkmale (z.B. Kanten, Farbverläufe) zu High-Level-Merkmalen zusammen. Aus diesem Grund werden Deep Learning Modelle als tiefe neuronale

Netze bezeichnet. Der ins Deutsche übersetzte Begriff „tief“ bezieht sich in diesem Zusammenhang auf die Anzahl der verborgenen Schichten des neuronalen Netzes. Im Vergleich zu herkömmlichen neuronalen Netzen, mit zwei bis drei verborgene Schichten, enthalten CNNs bis zu 150 Schichten. Seit 2012 werden die neuen Möglichkeiten der Deep Learning Methoden für viele Computer Vision Anwendungen, einschließlich Objekterkennung, Bildsegmentierung und Klassifizierung genutzt [121],[136].

Die großen Vorteile bei den Deep Learning Methoden, vor allem unter der Nutzung von CNNs, bestehen darin, dass eine vorgelagerte Merkmalerstellung entfallen und somit ein „End-to-End-Lernvorgang“ durchgeführt werden kann. Die Rohdaten und eine Aufgabe, beispielsweise eine Klassifikation, können in das Netz gegeben werden und dieses lernt, die Aufgabe automatisch zu erledigen.

In der Abbildung 2.16 ist die Vorgehensweise der Klassifizierung mittels Data Mining und Deep Learning schematisch dargestellt. Bei den Data Mining Methoden ist eine zusätzlich manuelle Merkmalerstellung und Auswahl notwendig. Dieser Schritt kann bei den Deep Learning Methoden unter der Nutzung von CNNs entfallen.

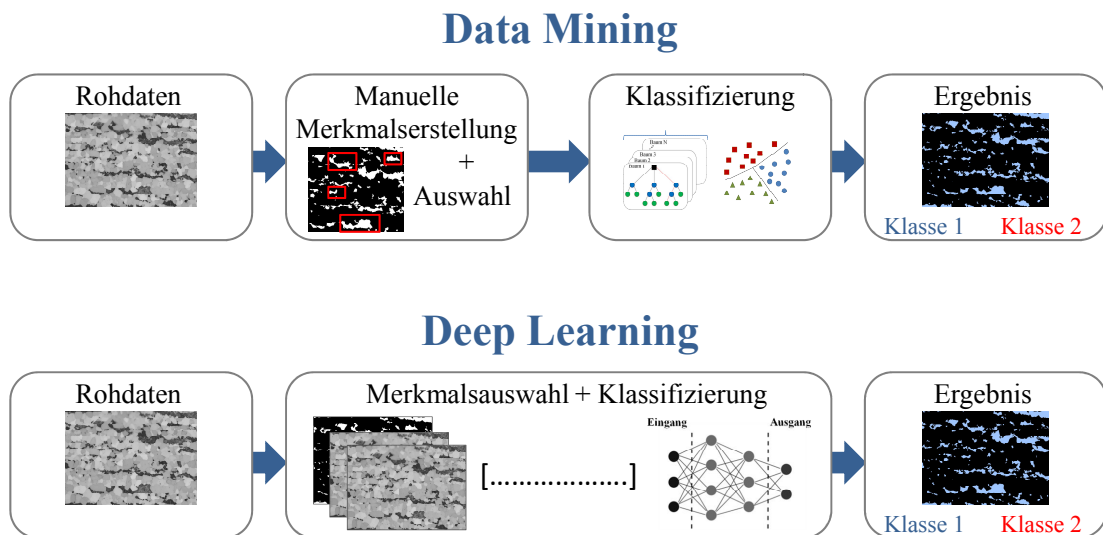


Abbildung 2.16: Vergleich der Vorgehensweise der Klassifizierung mittels Data Mining und Deep Learning. Bei den Data Mining Methoden ist eine manuelle Merkmalerstellung und Auswahl der Merkmale durch den Benutzer für die Modellbildung notwendig. Die Deep Learning Algorithmen extrahieren automatisch Merkmale, ohne Eingreifen des Benutzers und erstellen aus diesen ein Modell.

Ein großer Nachteil der Deep Learning Methoden im Vergleich mit Data Mining Ansätze ist, dass wesentlich größere Datenmengen benötigt werden. Um verlässliche und vertrauenswürdige Modelle zu erzeugen sind somit „riesige“ Datenmengen (Anzahl im Bereich mehrerer hunderttausend vorklassifizierter Daten, z.B. Bilder) unabdingbar. Damit verbunden wird zusätzlich eine hohe Rechenleistung notwendig. Im Vergleich dazu müssen bei Data Mining Ansätzen die Merkmale eines Objektes durch den Menschen definiert und die beste Kombination aus Merkmalsdaten und dem Klassifizierungsalgorithmus gefunden werden. Allerdings werden für die Modellbildung wesentlich weniger Daten benötigt (im Bereich von zehntausend vorklassifizierter Daten), um aussagekräftige Modelle zu erstellen. In Anwendungsbereichen, in welchen keine großen vorklassifizierten Daten verfügbar sind, können mit den Data Mining Methoden Klassifizierungsprobleme schneller erschlossen werden. Die benötigte Rechenleistung wird aufgrund der geringeren Datenmenge reduziert.

Die manuelle Merkmalserstellung der Data Mining Methoden stellt einen zusätzlichen Arbeitsaufwand dar und ist aus diesem Grund mit einem zeitlichen Nachteil im Vergleich zu den Deep Learning Methoden verbunden. Der große Vorteil, der durch eine manuelle Auswahl der Merkmalsdaten entsteht, ist, dass die zum Aufbau des Modells genutzten Merkmale ergänzend für weitere Auswertungen verwendet werden können. Da die Merkmale aus Messungen stammen, haben sie außerdem einen wissenschaftlichen Hintergrund. Neben der Klassifizierung können anhand der Merkmalsdaten beispielsweise noch weitere quantitative Aussagen gewonnen oder neue Merkmale berechnet werden. Darüber hinaus wird eine Korrelation der Klassifizierungsergebnisse mit den Merkmalsdaten ermöglicht. Die erstellten Merkmale können somit zum besseren Verständnis und zu einer umfassenden Charakterisierung des Problems beitragen. Ein weiterer Vorteil der Data Mining Methoden, der sich daraus ergibt, ist, dass eine Überprüfung der Leistungsfähigkeit der erstellten Modelle durch Experten möglich wird. Diese Aspekte bilden den großen Mehrwert der Data Mining Ansätze gegenüber den Deep Learning Ansätzen.

Bei der Wahl zwischen Data Mining Methoden und Deep Learning Methoden muss somit vor allem berücksichtigt werden, ob umfangreiche vorklassifizierte Daten zur Verfügung stehen und ob zur Problemlösung die zur Klassifizierung genutzten Merkmalsdaten noch mit anderen Fragestellungen korreliert werden sollen.

2.4.3 Anwendung in der Klassifizierung von Werkstoffgefügen

Im Bereich der Gefügebewertung und -klassifizierung werden die beschriebenen Methoden für Stähle, aber auch für andere Werkstoffe, bisher nur sehr eingeschränkt angewendet. Der Grund hierfür liegt in der großen Vielfalt an komplexen Strukturen der Gefügebestandteile. Zusätzlich ist die Einteilung und Abgrenzung der Gefügebestandteile um die Merkmalsdaten vorzuklassifizieren schwierig, da einheitliche Richtreihen oder Normen zur manuellen Klassifizierung fehlen, wie in Kapitel 2.3.1 für die Gefügebestandteile von niedriglegierten, kohlenstoffarmen Stählen gezeigt. Ein weiterer Aspekt, der Klassifizierungsansätze für Gefüge mittels maschinellen Lernens erschwert, ist, das Fehlen einheitlicher Gefügaufnahmen oder vollständiger Merkmalsdaten, wie in Kapitel 2.4.1 beschrieben. Dies erklärt, wieso die Methoden im Bereich der Gefügeklassifizierung bisher wenig Anwendung finden.

Um ein besseres Verständnis über die Nutzung dieser Methoden in der Gefügeklassifizierung zu erlangen, werden im Folgenden unterschiedliche in der Literatur beschriebene Klassifizierungsansätze aus dem Bereich der Materialwissenschaften vorgestellt. Die ersten Ansätze in der Gefügeklassifizierung beruhen auf den Data Mining Methoden unter der Nutzung verschiedener Gefüge- und Bildtexturparameter. Deep Learning Methoden wurden in den Gefügeklassifizierungsansätzen zunächst zur Merkmalsextraktion aus den Gefügaufnahmen genutzt, sodass eine manuelle Merkmalerstellung entfällt. Auf der Basis dieser Merkmalsdaten wurden dann Data Mining Modelle zur Klassifizierung erstellt. Aktuelle Arbeiten verwenden Deep Learning Methoden sowohl zur Merkmalerstellung als auch zur Modellbildung. Das Maß für die Beurteilung von Klassifizierungsergebnissen ist die sog. Klassifizierungsgenauigkeit. Es existieren verschiedene Definitionsformen der Genauigkeit, je nachdem auf welche Daten sich diese bezieht (z.B. Gesamtgenauigkeit (engl. accuracy), Genauigkeit (engl. precision), Kapitel 2.5.3). Im Folgenden werden diese Definitionsformen im Literaturüberblick nicht explizit unterschieden.

Einer der ersten Versuche im Bereich der Gefügeklassifizierung auf der Basis von Data Mining Verfahren ist für den Werkstoff Gusseisen entwickelt worden. Für Gusseisen existiert ein Klassifizierungssystem für unterschiedliche Graphitmorphologien nach der Norm EN ISO 945:1994. **Roberts et al.** nutzt die SVM als Klassifikator, um unterschiedliche Ausprägungen von Lamellengraphit in Gusseisen zu klassifizieren [137]. Die Merkmalsdaten für den Aufbau des Modells sind stereologische Parameter [138] sowie die GLCM-

Texturmerkmale [139] (Kapitel 2.2.3) aus LIMI-Aufnahmen mehrerer Referenzproben, die nach Norm von Experten vorklassifiziert waren. Die Klassen können auf Basis des Modells mit einer Genauigkeit von über 80 % unterschieden werden. **Velichko** und **Richter** haben den Ansatz von Roberts et al. auf andere Graphitmorphologien in Gusseisen erweitert und für unabhängige Proben eine Klassifizierungsgenauigkeit von etwa 95 % für die meisten der verschiedenen Graphitmorphologien erreicht [140],[141],[142]. Das entwickelte Verfahren zur Gusseisenklassifizierung ist in einer Software namens POCA implementiert. Neben diesen Arbeiten zeigen die Ergebnisse von **Gajalakshmi et al.** mit einer Genauigkeit von über 90 % das hohe Potential der SVM in Kombination mit pixelbasierten LBP-Parametern zur Klassifizierung von Gusseisen [143]. **Iacoviello et al.** nutzen morphologische Merkmale und ein SVM-Modell um ideale Graphitteilchen von irregulären Graphitteilchen in duktilem Gusseisen zu unterscheiden. Das Modell erreicht eine Genauigkeit von 95 % [144].

DeCost et al. entwickelten ein System auf Basis der SVM, welches eine Grundlage für eine visuelle Gefügesuchmaschine darstellt [145]. Für die Modellbildung werden visuelle Merkmale zur Errechnung eines mikrostrukturellen Fingerabdrucks (Merkmal Histogramm) aus den Mikroskopaufnahmen extrahiert. Für eine Klassifizierung von sieben verschiedenen Materialien (Kugelgraphitguss, Grauguss, Temperguss, Glühzwillinge, Messing, über-eutektoider Stahl und Superlegierungen) mit jeweils einem separaten SVM-Modell für jede Bildklasse kann das Klassifizierungssystem eine Genauigkeit von größer 80 % erreichen. Für ein Suchbild kann durch Testen jedes Modells die beste Übereinstimmung mit den Gefügen gefunden werden. Dieser neue Ansatz bildet eine Basis zur Archivierung, Analyse und Nutzung unterschiedlicher mikrostruktureller Daten. Weiterhin nutzen **DeCost et al.** in einer anderen Studie eine SVM, um eine autonome Charakterisierung von Pulverpartikeln zu erreichen. Mit visuellen Merkmalen können im Training Klassifizierungsgenauigkeiten von $96,5 \pm 2,5$ % erreicht werden [146].

Klassifizierungssysteme mittels Data Mining Methoden, die verschiedene Gefügebestandteile in Stahl unterscheiden sind noch sehr selten. **Komenda** zeigt, dass die Methoden des überwachten maschinellen Lernens zur Klassifizierung von verschiedenen Gefügebestandteilen in gemischten Stahlgefügen geeignet sind [147]. Die Gefüge zeigen oberen und unteren Bainit, phosphorreichen Ferrit, Perlit und Martensit. Aus manuell markierten Bereichen auf LIMI-Aufnahmen werden zur Erstellung des Modells pixelbasierte

Bildmerkmale mittels des Bildanalyseprogramms MicroGOP2000/S von ContextVision (Schweden) ausgelesen. Das Modell wird mit dem Bild-Klassifikator (Image Classifier, IC) des Programms erstellt. Es wird in der Publikation nicht dargestellt, welche Merkmale zur Klassifizierung der Gefügebestandteile verwendet werden. Außerdem ist keine Klassifizierungsgenauigkeit berechnet und mit dem dargestellten Bild ist es schwierig, die Klassifizierungsleistung zu bestimmen. Aus den Darstellungen der Ergebnisse ist ersichtlich, dass unterer Bainit und Martensit nicht klar voneinander unterschieden werden und Regionen überhaupt nicht klassifiziert sind. **Liu et al.** nutzen für die pixelbasierte Klassifizierung von verschiedenen Bestandteilen in Mehrphasenstählen aus LIMF-Aufnahmen eine Kombination aus einem kNN-Klassifikator und GLCM-Texturmerkmalen [101]. Bei Stählen mit drei Klassen (Martensit, oberer Bainit und unterer Bainit) zeigt der Klassifikator respektable Ergebnisse und für martensitisch-bainitische Gefüge eine gute Übereinstimmung in Bezug auf den Anteil der Gefügebestandteile im Vergleich zu Ergebnissen der manuellen Klassifizierung durch Experten. Für Perlit kann der Klassifizierungsablauf nicht verwendet werden, so dass in einem ersten Ansatz künstlich erzeugte Strukturen mit einer Genauigkeit von 93,8 % getestet wurden. In ihrer Studie zeigen **Bulgarevich et al.** eine pixelbasierte Segmentierung von niedrigkohligem Stahlgefügen aus LIMF-Aufnahmen für Perlit, Ferrit, Bainit und Martensit [148]. Durch die Extraktion hochdimensionaler Merkmalswerte auf Basis der Bildverarbeitung in Kombination mit einem Random Forest Klassifikator kann eine gute Unterscheidung der Gefügebestandteile für Mehrphasengefüge erzielt werden. Die Ergebnisse der automatischen Bestimmung des Phasenanteils zeigen eine gute Übereinstimmung mit der manuellen Beurteilung.

Wie bereits die manuellen Klassifizierungsschemata zeigen, eignen sich EBSD-Daten ebenfalls für eine Unterscheidung von Phasen und Gefügebestandteilen in Stahlgefügen. In der Studie von **Tsutsui et al.** werden EBSD-Daten genutzt, um Klassifizierungsmodelle für eine Unterscheidung von Martensit und Bainit zu erreichen [149]. Mit der SVM als Klassifikator können Genauigkeiten von bis zu 94 % und mit dem Random Forest Klassifikator von bis zu 97 % erreicht werden.

Ein erster Ansatz, in welchem Deep Learning Methoden für die anspruchsvollen Aufgaben der Merkmalerstellung und Data Mining Methoden für die Modellbildung genutzt werden, ist von **Chowdhury et al.** entwickelt worden. In einer umfassenden Untersuchung von Computer

Vision und maschinellen Lernmethoden zeigen sie, dass vortrainierte neuronale Netzwerke zur Merkmalsextraktion auf Bildern mit dendritischen Strukturen aus Legierungen mit unterschiedlichen Sn-Ag-Cu-Zusammensetzungen verwendet werden können [150]. Mit diesen Merkmalen erreichten sie maximale Klassifizierungsgenauigkeiten von 97 %, indem eine lineare SVM als Klassifikator verwendet wird, um zwischen Gefügeaufnahmen mit und ohne Dendriten zu unterscheiden. In einer Studie mit REM-Aufnahmen hochkohligter Stähle vergleichen **DeCost et al.** die Klassifizierungsergebnisse von CNN-basierten Bildtexturparametern basierend auf einer statistischen Verteilung von Merkmalen in der Bildtextur (Bag of Visual Words (BoW)-Darstellung) [151]. Ein SVM-Ansatz wird verwendet, um Gefüge sowohl nach primären Mikrokomponenten als auch nach Glühbedingungen zu klassifizieren. Es wird gezeigt, dass kodierte lokale Merkmale und domänenübertragene neuronale Faltungsnetzwerkdarstellungen eine Klassifizierungsgenauigkeit größer 95 % erreichen können. **Kondo et al.** verwenden CNN zur Extraktion von Merkmalen auf einen REM-Datensatz für keramische Materialien und zeigen, dass diese Methode bereits für kleinere Datensätze effektiv sein kann [152]. **Ling et al.** untersuchen vier verschiedene CNN-basierte Merkmale aus REM-Aufnahmen anhand mehrerer Datensätze (Titanlegierungen, Stähle mit unterschiedlichen Wärmebehandlungen von DeCost et al. [130], synthetische Bilder mit Pulverpartikeln) auf ihre Verallgemeinerbarkeit und Interpretationsfähigkeit [120]. Als Klassifikator nutzten sie einen Random Forest mit 400 Entscheidungsbäumen. Für alle drei Fälle konnten gute Modelle aufgebaut werden. Für die Stahlgefüge kann eine Klassifizierungsgenauigkeit vergleichbar mit DeCost et al. (95 %, [151]) und für die synthetischen Strukturen vergleichbar mit DeCost et al. (89 %, [153]) erreicht werden.

Azimi et al. verwenden ebenfalls die Kombination aus Deep Learning und Data Mining Methoden und zum ersten Mal zusätzlich reine Deep Learning Ansätze zur Klassifizierung. Die verwendete Gefügeaufnahmen-Datenbank besteht aus LIMI- und REM-Aufnahmen von zweiphasigen niedrigkohligen Stahlgefügen und wird in erweiterter Form ebenfalls in der vorliegenden Arbeit verwendet. Bei Azimi et al. werden verschiedene Ansätze verfolgt, um Daten zu extrahieren. Zum einen werden vor der Klassifizierung die Bereiche der kohlenstoffreichen Phase (im Folgenden als Objekte bezeichnet) mittels Methoden der quantitativen Gefügeanalyse aus den Mikroskopaufnahmen extrahiert und eine objektweise Klassifizierung durchgeführt. Im Vergleich dazu wird eine pixelbasierte CNN-Klassifizierung getestet. Im ersten Ansatz werden mittels CNNs Merkmale der Objekte extrahiert und mit

einer SVM klassifiziert. Eine Klassifizierungsgenauigkeit von 64,84 % auf der Basis von REM-Aufnahmen wird für die vier Klassen Perlit, Bainit, Martensit und angelassener Martensit erzielt. Eine leicht gesteigerte Genauigkeit von 66,50 % kann erreicht werden, wenn CNNs sowohl zum Analysieren als auch zum Klassifizieren der gefügebasierten Objekte genutzt werden. Die höchste Genauigkeit mit 95,23 % kann mit dem pixelbasierten Ansatz von Fully Convolutional Neural Networks (FCNN) in Kombination mit einer anschließenden Mehrheitsentscheidung (engl. majority voting) erreicht werden. In diesem reinen Deep Learning Ansatz wurden die Daten zusätzlich künstlich vervielfältigt (engl. data augmentation), damit eine ausreichend große Datenmenge für jede Klasse zur Verfügung steht. Für die LIM1-Aufnahmen lassen sich mittels reinen Deep Learning Methoden mit Genauigkeiten von 70,14 % ebenfalls gute Klassifizierungsergebnisse erzielen. In der empirischen Studie von **Lorena et al.** wird die Eignung von vier verschiedenen CNN-Architekturen mit unterschiedlichen Tiefen für eine automatische Gefügeklassifizierung untersucht und verglichen [154]. Es werden dazu Gefügebildaufnahmen aus der UHCSDB-Datenbank für kohlenstoffreiche Stähle genutzt, welche in sieben Klassen (Perlit + Widmanstätten Ferrit, Perlit, Sphäroidit, Perlit + Sphäroidit, Netzwerk, Martensit, Sphäroidit + Widmanstätten Ferrit) eingeteilt sind [130]. Die höchste Genauigkeit, die im Mittel für alle Klassen erreicht werden kann, ist 78,5 %. Es wird gezeigt, dass ein großer Unterschied bei der Klassifizierungssicherheit für einzelne Klassen besteht, welcher beispielweise bezogen auf die mittlere Genauigkeit (78,5 %) von 43 % bis zu 97 % reicht. Die große Differenz zwischen den Werten wird auf die stark variierende Anzahl der Bilddaten pro Klasse zurückgeführt. Dieses Problem konnte innerhalb der Studie auch durch Datenvervielfältigungstechniken (engl. data augmentation) nicht vollständig gelöst werden.

Zusammenfassung

In der Tabelle 2.15 sind die für diese Arbeit wichtige Klassifizierungsansätze im Bereich der Werkstoffklassifizierung noch einmal kurz zusammengefasst. Hieraus wird deutlich, dass die SVM sich neben den CNNs als sehr erfolgreich im Bereich der Gefügeklassifizierung gezeigt hat. Außerdem kommen sowohl morphologische als auch pixelbasierte Merkmale (z.B. GLCM-Parameter oder LBP-Parameter) zur Anwendung.

2 Stand der Technik

Tabelle 2.15: Zusammenfassung von Publikationen im Bereich der Gefügeklassifizierung verschiedener Werkstoffe mittels Data Mining und Deep Learning Methoden.

Publikationen	Werkstoff	Klassifikator	Quelle	Merkmal	Genauigkeit	Jahr
Komenda [147]	Stahl	IC	LIMI	Pixelbasiert	Keine Angabe	2001
Roberts et al. [137]	Gusseisen	SVM	LIMI	Stereologie, GLCM	80 %	2003
Velichko und Richter et al. [140],[141],[142]	Gusseisen	SVM	LIMI	Stereologie, GLCM	95 %	2008
Liu et al. [101]	Stahl (3 Klassen)	kNN	LIMI	GLCM	< 80 %	2014
	Stahl (2 Klassen)	kNN	LIMI	GLCM	≈ Experten	
DeCost et al. [145]	6 verschiedene Werkstoffe + Stahl	SVM	LIMI	Visuelle Bildmerkmale	> 80 %	2015
Iacoviello et al. [144]	Gusseisen	SVM	LIMI	Morphologie, PCA	95 %	2017
DeCost et al. [146]	Pulverpartikel	SVM	REM	Visuelle Bildmerkmale	96,5 ± 2,5 %	2017
DeCost et al. [151]	Stahl	SVM	REM	CNN	95 %	2017
Kondo et al. [152]	Keramische Materialien	CNN	REM	CNN	≈ Experten	2017
Ling et al. [120]	Titanlegierung, Stahl, Pulver	RF	REM	CNN	Vergleichbar mit [151]	2017
Bulgarevich et al. [148]	Stahl (3 Klassen)	RF	LIMI	Merkmale aus der Bildverarbeitung	≈ Experten	2018
Gajalakshmi et al. [143]	Gusseisen	SVM	LIMI	GLCM, LBP	90 %	2018
Azimi et al. [155]	Stahl (4 Klassen)	SVM	REM	CNN	65 %	2018
		CNN	REM	CNN	67 %	
		FCNN	REM	FCNN	95 %	
		FCNN	LIMI	FCNN	70 %	
Lorena et al. [154]	Stahl (7 Klassen)	CNN	REM	CNN	17-78 %	2018
Tsutsui et al. [149].	Stahl (2 Klassen)	SVM	EBSD	EBSD	60-94 %	2019
		RF	EBSD	EBSD	72-97 %	

Neben der Extraktion der Merkmale aus LIM-*Aufnahmen* werden in neueren Ansätzen vermehrt detailreichere REM-*Aufnahmen* sowie EBSD-Daten genutzt. CNNs zeigen ein hohes Potential für Klassifizierungsansätze auf Basis mikroskopischer *Aufnahmen*. Allerdings ist die Entscheidung des CNN-Klassifikators gerade im Bereich der Gefügeklassifizierung oft nicht mehr nachvollziehbar, da die abstrakten CNN-Merkmale nicht mit den Gefügebestandteilen auf den mikroskopischen *Aufnahmen* korreliert werden können. Die manuell erstellten Merkmalsdaten der Data Mining Ansätze auf der Basis von quantitativen Gefügedaten sind im Gegensatz dazu direkt mit der Morphologie oder der Bildtextur der Gefüge in mikroskopischen *Aufnahmen* korrelierbar. Dies stellt den großen Mehrwert dieses Ansatzes in der Gefügeklassifizierung dar. Die Methoden der quantitativen Gefügeanalyse werden zudem stetig weiterentwickelt und automatisiert, sodass die Analysen schneller und effizienter erfolgen können. Auch bieten die Entwicklungen in der Informatik neue Möglichkeiten im Bereich der Segmentierung von Strukturen oder dem Erkennen von Texturen [58],[148],[156],[157],[158].

Data Mining Methoden auf Basis der klassischen Methoden des maschinellen Lernens bieten somit ein großes Potential für neue Ansätze einer objektiven und reproduzierbaren Gefügeklassifizierung von Stählen. Die Möglichkeit der Korrelation der Klassifizierungsergebnisse mit den Gefügebestandteilen auf mikroskopischen *Aufnahmen* ist als besonderer Pluspunkt hervorzuheben. Zusätzlich dazu wäre ebenfalls eine Korrelation signifikanter Gefügemerkmale mit Eigenschaften oder Prozessparametern denkbar. Durch diese Möglichkeiten könnten weitere Verknüpfung mit materialwissenschaftlichem Hintergrund ermöglicht werden. Im Bereich der Gefügeklassifizierung hat sich das Stützvektorverfahren (SVM), wie aus Tabelle 2.15 ersichtlich, als erfolgreiche Methode für eine Trennung von komplexen Merkmalsdaten herausgestellt.

2.5 Stützvektorverfahren (Support Vector Machine / SVM)

Der Klassifizierungsansatz für zweiphasige niedriglegierte Stähle in der vorliegenden Arbeit basiert auf dem Stützvektorverfahren. Das Stützvektorverfahren gehört zu den etablierten Methoden im Bereich der Klassifizierung. Generell sind SVMs bei einer verfügbaren Datenbasis auf verschiedenste Anwendungsgebiete der automatischen Klassifikation anwendbar, wie im Kapitel 2.4 für materialwissenschaftliche Beispiele gezeigt. In diesem Kapitel werden die Grundlagen der Modellbildung mittels SVM sowie die Erstellung und Auswertung eines aussagekräftigen und robusten Modells näher erläutert.

2.5.1 Grundlagen der Modellbildung

Zunächst muss zur Anwendung dieser Methode eine ausreichend große vorklassifizierte Datenbasis für die vordefinierten Klassen (z.B. Klasse +1 und Klasse -1) zur Verfügung stehen. Diese Daten bestehen aus verschiedenen Merkmalen für ein Objekt einer Klasse. Bei der Gefügeklassifizierung bestehen die Merkmalsdaten beispielsweise aus morphologischen, stereologischen oder pixelbasierten Parametern (Tabelle 2.15) für ein Objekt einer Gefügebestandteilklasse. Die Merkmalsdaten und die Klassenzuordnungen bilden somit den vorklassifizierten Merkmalsdatensatz. Um die Modellbildung effektiv zu gestalten, werden in der Regel mehrere Eingangsparameter (Merkmale) pro Objekt benötigt, da eine einfache Klassentrennung anhand eines einzelnen Merkmals bei komplexen Problemen in den meisten Fällen nicht möglich ist.

Die vorklassifizierten Merkmalsdaten der Klassen bilden die Basis des Klassifizierungsmodells. Die Trainingsdaten liegen somit in der Form $X = \{\mathbf{x}_i, y_i\}$ vor, wobei \mathbf{x}_i mit $i = 1, \dots, n$ der Merkmalsvektor eines Objektes x der korrespondierenden Klassen y , bei einem Zweiklassenproblem $y_i \in \{-1, +1\}$ darstellt [159]. Somit wird jedes Objekt einer Klasse bei der SVM durch einen Merkmalsvektor \mathbf{x}_i in einem n -dimensionalen Datensatz repräsentiert. Der n -dimensionale Merkmalsvektor \mathbf{x}_i gehört zu einem n -dimensionalen Merkmalsraum (engl. feature space), wobei n die Anzahl der Merkmale ist. Jedes Objekt entspricht einem Punkt in diesem Merkmalsraum, so dass die Objekte einer bestimmten Klasse einen Cluster bilden. Mathematische Berechnungen bestimmen, wo sich der Merkmalsvektor \mathbf{x}_i für ein bestimmtes Objekt einer Klasse innerhalb des Raums befindet. Die Klassifizierung neuer Objekte in diesem Raum basiert auf einer ausgewählten Entscheidungsregel, die angewendet

wird, um das neue Objekt einer Klasse zuzuordnen. Eine Möglichkeit besteht darin, den Raum mit einer Grenze (Schwellwert) in Unterräume zu unterteilen, die mathematisch als Oberfläche (sog. Hyperebene) definiert ist [160].

Die Punkte \mathbf{x} , die auf der Hyperebene liegen, erfüllen hierbei die Bedingung:

$$\mathbf{w} \cdot \mathbf{x} + b = 0$$

wobei \mathbf{w} der Normalenvektor zur Hyperebene, $|b|/\|\mathbf{w}\|$ der senkrechte Abstand von der Hyperebene zum Ursprung und $\|\mathbf{w}\|$ die euklidische Norm von \mathbf{w} ist [159].

Die Klassenzugehörigkeit eines neuen Objektes x kann durch eine automatische Schwellwertbestimmung in einen Unterraum (je nachdem auf welcher Seite der Hyperebene der Punkt liegt) bestimmt werden, in den der Merkmalsvektor \mathbf{x}_i des Objektes fällt. Die Hyperebene wird mathematisch durch die ihr am nächsten liegenden Vektoren (sog. Stützvektoren, engl. support vectors) definiert (Abbildung 2.17). Der Abstand der Vektoren, die der Hyperebene am nächsten liegen (d_+ und d_-), wird dabei maximiert (sog. Separationsbreite, engl. margin = $|d_+| + |d_-|$).

Für den Fall, dass die Daten linear trennbar sind, wird im Stützvektorverfahren zur Modellbildung die Hyperebene mit der größten Separationsbreite (engl. maximum margin) gesucht. Dies kann im einfachsten Fall wie folgt beschrieben werden [159]:

$$\mathbf{w} \cdot \mathbf{x}_i + b \geq +1 \text{ für } y_i = +1$$

$$\mathbf{w} \cdot \mathbf{x}_i + b \leq -1 \text{ für } y_i = -1$$

Diese Gleichungen können kombiniert werden zu:

$$y_i (\mathbf{w} \cdot \mathbf{x}_i + b) - 1 \geq 0 \quad \forall i$$

Punkte die auf der Hyperebene H_1 liegen ($\mathbf{w} \cdot \mathbf{x}_i + b = +1$) haben einen Abstand vom Ursprung von $|+1 - b|/\|\mathbf{w}\|$. Für die Hyperebene H_2 ergibt sich unter gleicher Betrachtung $|-1 - b|/\|\mathbf{w}\|$. Wenn nun $d_+ = d_- = 1/\|\mathbf{w}\|$ ist, ist die Separationsbreite $2/\|\mathbf{w}\|$. In diesem Fall sind die Hyperebenen H_1 und H_2 parallel zueinander und alle Objekte sind außerhalb der Separationsbreite. Durch Minimieren von $\|\mathbf{w}\|^2$ kann ein Paar Hyperebenen gefunden werden, die die maximale Separationsbreite bilden [159],[160].

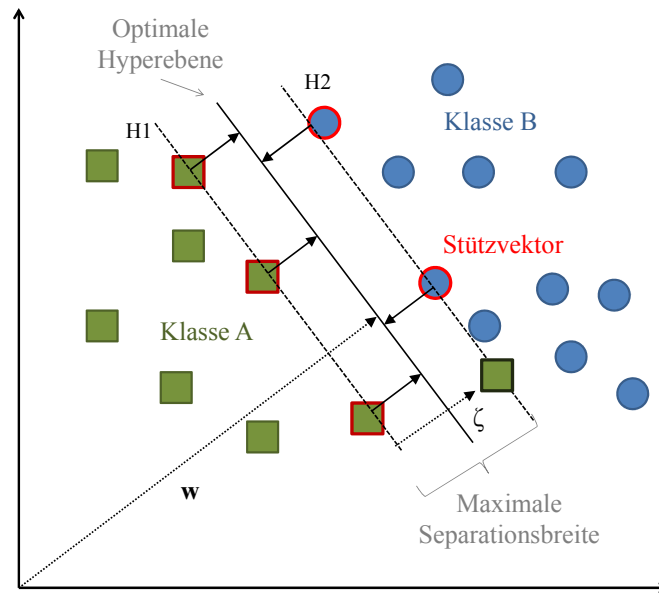


Abbildung 2.17: Schematische Darstellung der Trennung zweier Klassen A und B durch eine Hyperebene. Die Hyperebene wird durch die Stützvektoren beschrieben (modifiziert nach [161]).

Wenn die Daten sich nicht mehr eindeutig linear trennen lassen, besteht die Möglichkeit, die Lage der Hyperebene durch zusätzliche fehlergewichtete Schlupfvariablen ζ_i mit $i = 1, \dots, n$ anzupassen (sog. soft margin hyperplane, Abbildung 2.17) [172]. Dies kann wie folgt beschrieben werden:

$$\mathbf{w} \cdot \mathbf{x}_i + b \geq +1 - \zeta_i \quad \text{für } y_i = +1$$

$$\mathbf{w} \cdot \mathbf{x}_i + b \leq -1 + \zeta_i \quad \text{für } y_i = -1$$

$$\zeta_i \geq 0 \quad \forall i$$

Die Schlupfvariable ζ_i erlaubt es dem Klassifikator, einzelne Objekte falsch zu klassifizieren. Je mehr Fehler zugelassen werden, desto größer kann die Separationsbreite werden. Um Fehler und Separationsbreite sinnvoll gegeneinander abzuwägen, kann eine Anpassung der Schlupfvariablen über den Hyperparameter C eingestellt werden. Hierfür wird ein Strafterm zur Kostenfunktion $\|\mathbf{w}\|^2$ addiert [102].

$$\|\mathbf{w}\|^2 + C \sum_{i=1}^n \zeta_i \quad \text{für } C > 0$$

Der Parameter C ist eine Konstante und dient als Maß dafür, wie stark die Fehlklassifizierung eingestuft wird [160],[162].

Eine Hyperebene erlaubt zunächst eine lineare Trennung der Daten. Eine Bedingung, die für eine Menge aus realen Objekten im Allgemeinen nicht erfüllt werden kann. Im Fall nicht linear trennbarer Daten kann der sogenannte „Kernel-Trick“ angewendet werden. Dabei wird eine Transformation der Daten in einen höher dimensional Raum durchgeführt, in welchem eine lineare Separierbarkeit möglich wird. Diese Datentransformation wird mit Hilfe unterschiedlicher Kernel-Funktionen ermöglicht. Zu den am häufigsten verwendeten Kernel-Funktionen zählen der lineare Kernel, der polynomiale Kernel, der Sigmoid Kernel oder der Radial Basis Funktion (RBF-) Kernel [160],[163]. In dem neuen Raum mit genügend hoher Dimensionsanzahl werden verschachtelte Vektormengen linear trennbar und die Definition einer Hyperebene wird erneut möglich, wie in Abbildung 2.18 dargestellt [162],[164]. Kernel-Funktionen haben somit einen signifikanten Einfluss auf die Lage der Entscheidungsebene.

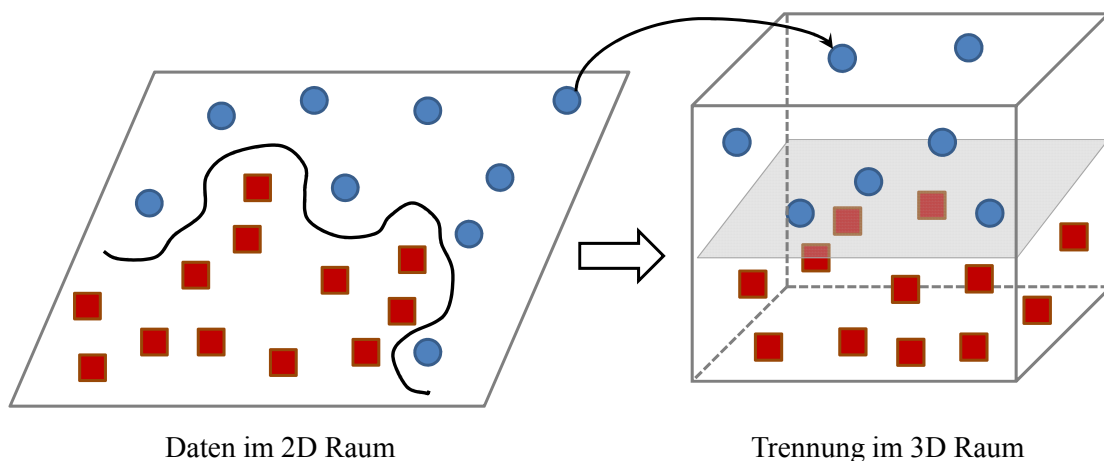


Abbildung 2.18: Schematische Darstellung eines nicht linearen Zweiklassenproblems im 2D Raum und die Trennung der Daten unter Verwendung eines nicht linearen Kernels im 3D Raum (modifiziert nach [161]).

Die wichtigsten Hyperparameter bei der SVM unter Nutzung des polynomialen und des RBF-Kernels für nicht lineare Fragestellungen sind der Parameter C , für die Lage der Separationsbreite, und der Parameter γ , welcher den Einfluss eines einzelnen Trainingspunktes festlegt [162]. Diese Parameter werden während der Modellbildung im sog. Trainingsprozess angepasst, so dass das Modell die Trainingsdaten bestmöglich abbildet. Das Ziel bei der Modellbildung ist es eine hohe Generalisierbarkeit des Modells einzustellen.

Dadurch wird sichergestellt, dass die zum Trainieren des Modells verwendeten Daten (= Trainingsdaten) gut repräsentiert sind, das Modell allerdings flexibel bleibt, um neue, unbekannte Daten (= Testdaten) mit möglichst hoher Genauigkeit klassifizieren zu können [165].

Die neuen, unbekanntenen Testdaten werden bei der Klassifizierung einer der vordefinierten Klassen des Modells mit einer bestimmten Sicherheit zugeordnet. Wenn das Modell im Training sehr gute Ergebnisse liefert, aber beim Testen niedrige Genauigkeiten zeigt, ist von einer Überanpassung (engl. overfitting) des Modells auszugehen [166]. Eine Überanpassung bedeutet, dass das Modell bekannte Trainingsdaten exakt wiedergeben kann, aber die Entscheidungsgrenzen sich auf Kosten der Verallgemeinerungsfähigkeit zu stark an den Trainingsdaten orientieren. Der Zusammenhang zwischen der Fehlerrate und der Modellkomplexität für Trainings- und Testdaten ist in Abbildung 2.19 gezeigt.

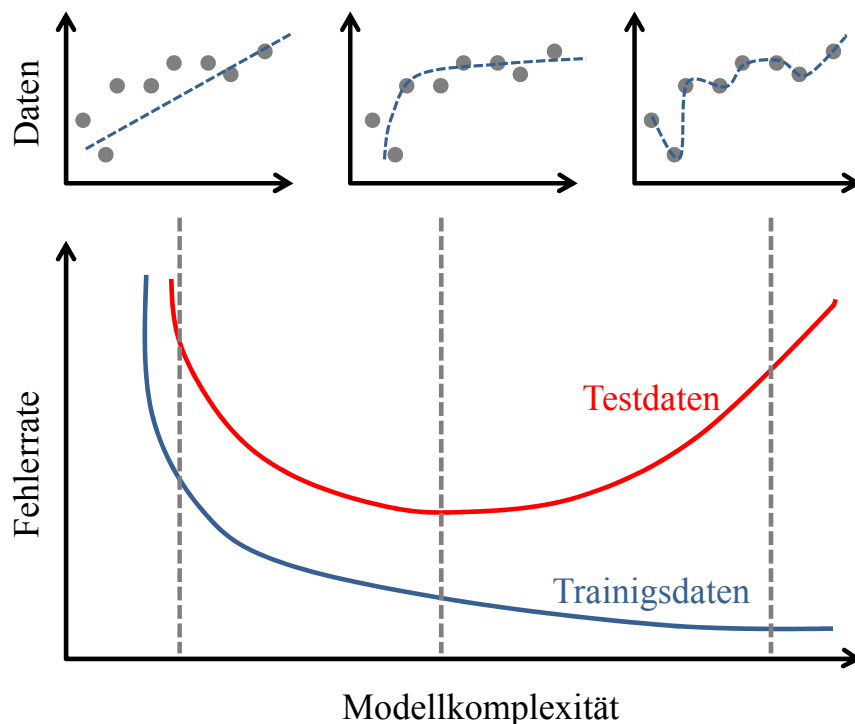


Abbildung 2.19: Darstellung der Generalisierbarkeit und des Problems der Überanpassung eines Modells anhand der Abweichung von Trainings- und Testdaten in Abhängigkeit von der Modellkomplexität (modifiziert nach [165]).

Zunächst ist die Modellkomplexität niedrig und sowohl die Trainings- als auch die Testdaten zeigen eine hohe Fehlerrate. Mit steigender Modellkomplexität werden die Trainingsdaten immer besser abgebildet und die Fehlerrate der Klassifizierung sinkt, je genauer das Modell die Trainingsdaten abbildet. Bei den Testdaten sinkt die Fehlerrate zunächst mit der Komplexität des Modells und steigt bei hoher Komplexität erneut an. Im Minimum der Fehlerrate für die Testdaten zeigt das erstellte Modell die höchste Generalisierbarkeit. Es kann sowohl eine hohe Klassifizierungsgenauigkeit für die Trainingsdaten als auch für die Testdaten gefunden werden.

Für die Erstellung eines Modells bedeutet dies, dass das Minimum, an welchem Trainings- und Testdaten einen geringen Abstand bei möglichst niedriger Fehlerrate und gleichzeitig hoher Klassifizierungsgenauigkeit zeigen, gefunden werden muss. Eine Methode um eine Überanpassung zu erkennen, ist, die Klassifizierungsergebnisse von Trainingsdaten mit unabhängigen Testdaten bei der Modellbildung zu vergleichen. Liegen die Klassifizierungsergebnisse nah beieinander, zeigt das Modell eine hohe Generalisierbarkeit [165].

Bei der Modellbildung kann die Überanpassung durch eine Optimierung der Hyperparameter C und γ vermieden werden. Ein hoher Wert für C lässt wenig falsch klassifizierte Punkte zu und führt zu einem Modell, welches stark an den Trainingsdaten orientiert ist. Ein kleineres C kann somit eine höhere Generalisierbarkeit ermöglichen, indem die Entscheidungsgrenzen des Modells ausgeweitet werden. Für den Parameter γ glätten größere Werte den Einflussbereich und sorgen für eine höhere Generalisierbarkeit des Modells im Vergleich zu kleineren Werten.

In vielen Anwendungen ist die Problemstellung nicht auf zwei Klassen beschränkt, sondern eine Mehrklassenklassifizierung gefordert. Neben klassischen Ansätzen, mehrere SVMs zu kombinieren (engl. one versus one, one versus all), existieren Methoden wie die sogenannte LibSVM (engl. library for support vector machines), welche verschiedene Variationen und Kombinationen daraus sind und sich für eine Multiklassenklassifikation eignen [167],[168].

Für ein erfolgreiches Klassifizierungsmodell ist nicht allein die Einstellung der SVM entscheidend. Die Datenbasis, auf der das Modell aufgebaut ist, muss bestimmte Bedingungen erfüllen.

2.5.2 Datenvorverarbeitung und Merkmalsauswahl

Neben der Anpassung der Hyperparameter ist die Vorverarbeitung der Daten entscheidend für eine erfolgreiche Modellbildung [102],[131]. Die Rohdaten, die für den Aufbau von Klassifizierungssystemen genutzt werden, können redundante oder für die Klassifizierung nicht entscheidende Merkmale sowie Ausreißer enthalten. Um die Daten für Data Mining Methoden nutzbar zu machen, müssen diese bereinigt und gegebenenfalls transformiert werden [102]. Wenn die Merkmale beispielsweise unterschiedliche Skalenbereiche aufweisen, kann dies die Klassifizierungsleistung beeinträchtigen. Bei SVM-Modellen wirken sich unterschiedlich skalierte Merkmale auf die Gewichtung der Parameter bei der Modellbildung aus, da die Länge der Stützvektoren durch die Absolutwerte der Merkmale bestimmt werden. Durch eine Normalisierung der Daten mittels Methoden wie der Standardisierung, der Range-Transformation oder der Interquartile-Range-Transformation [131], können die Merkmalswerte in vergleichbare Skalenverhältnisse eingeordnet werden. Weiterhin erhöht sich mit steigender Anzahl an Merkmalen die nötige Komplexität des Modells. Die Anzahl der Merkmale kann mit Algorithmen, die für die Klassifizierung nicht relevante Merkmale detektieren und entfernen (Merkmalsauswahl, engl. feature selection), reduziert werden. Dies führt zu einer Verringerung der Komplexität und der Dimension des Modells, indem eine Teilmenge des ursprünglichen Datensatzes unter Beibehaltung der Klassifizierungsgenauigkeit ausgewählt wird [169],[170]. Zur Reduktion der Merkmale können Filter- und Gewichtungsmethoden oder Methoden, die den Klassifikator als Entscheidungskriterium mit nutzen, angewendet werden [102]. Zu den ersten Methoden zählt beispielsweise das Entfernen korrelierter Merkmale. Methoden, bei denen der Klassifikator in den Entscheidungsprozess mit eingebunden ist, optimieren die Anzahl und die Kombination der Merkmale direkt innerhalb der Modellbildung [171],[172]. Der Vorteil dieser Methoden besteht darin, dass die wesentlichen Merkmale für das Modell aufgrund der Klassifizierungsgenauigkeit explizit ausgewählt werden können. Allerdings benötigen diese Methoden sowohl eine große Rechenleistung als auch eine hohe Rechenzeit, da für jede Merkmalkombination ein Modell trainiert und getestet werden muss. Es gibt verschiedene Algorithmen zur Merkmalsauswahl wie die Rückwärtseliminierung (engl. backward selection), bei welcher aus dem Datensatz systematisch ein Merkmal nach dem anderen entfernt wird, oder die evolutionäre Merkmalsauswahl. Diese wählt die relevantesten Merkmale des gegebenen Datensatzes mit Hilfe eines genetischen Algorithmus aus. Ein genetischer Algorithmus ist eine Methode zur

Merkmalsauswahl, die den Prozess der natürlichen Evolution nachahmt. Diese Methode wird eingesetzt, um Lösungen für Optimierungs- und Suchprobleme zu finden [173].

Durch eine systematische Datenvorverarbeitung und die Auswahl der signifikanten Merkmale können die Klassifizierungsmodelle verbessert werden, zum einem indem die Komplexität verringert und zum anderen indem die Generalisierbarkeit erhöht wird. Zusätzlich kann durch die Auswahl signifikanter Merkmale ein besseres Verständnis der Daten in Korrelation zum Klassifizierungsproblem erhalten werden. Aussagen über die Klassifizierungsgenauigkeit eines Klassifizierungsmodells können aus einer sog. Konfusionsmatrix gewonnen werden.

2.5.3 Validierung der Ergebnisse (Konfusionsmatrix)

Die Ergebnisse der Klassifizierung und eine Beurteilung des erstellten Klassifizierungsmodells kann über die Konfusionsmatrix dargestellt werden [174]. In der Matrix sind für die Trainingsdaten die Häufigkeiten für alle möglichen Kombinationen von ermittelter Klasse (durch das Modell) und tatsächlicher Klasse (Label = ground truth), welche beispielsweise durch die Experten festgelegt wurde, eingetragen. Die Einträge der Matrix stehen stellvertretend für die Anzahl an klassifizierten Objekten der jeweiligen Klassifikationsgruppe. Die Klassifizierungsgenauigkeit wird durch die Auswertung der Konfusionsmatrix ermittelt, indem die Ergebnisse des Klassifizierungsmodells der Objekte der Trainingsdaten mit den Labels der Daten abgeglichen werden [175]. Für ein N-Klassen-Problem besteht die Konfusionsmatrix aus einer $N \times N$ -Matrix. Die Hauptdiagonale der Matrix zeigt die korrekt klassifizierten Daten (Ergebnis des Modells entspricht dem Label) und die Nebendiagonalen zeigen die falsch klassifizierten Daten (Ergebnis des Modells entspricht nicht dem Label) an. Eingetragen wird jeweils die Auftretshäufigkeit einer Merkmalskombination.

Die aus der Konfusionsmatrix berechnete Gesamtgenauigkeit (engl. accuracy) gibt an, wie hoch der Prozentsatz an richtig klassifizierten Objekten für alle Klassen ist und beschreibt somit die Treffsicherheit des gesamten Modells [176],[177],[178]. Weitere Kennwerte, die aus der Konfusionsmatrix berechnet werden können, sind die Genauigkeit (engl. precision) und die Sensitivität (engl. recall). Zusätzlich ist der *kappa*-Wert ein charakteristisches Maß für die Beurteilung eines Klassifizierungsmodells [179]. Mathematisch können die Kennwerte wie in Tabelle 2.16 dargestellt beschrieben werden.

Tabelle 2.16: Mathematische Beschreibung der Kennwerte Gesamtgenauigkeit, Genauigkeit, Sensitivität und *kappa*, die aus der Konfusionsmatrix berechnet werden können um die Qualität eines Modells zu beurteilen [176],[177],[178],[179].

Kennwerte	Mathematische Beschreibung
<i>Gesamtgenauigkeit</i> (engl. <i>accuracy</i>)	Quotient aus der Summe der Einträge aus der Hauptdiagonale (richtig klassifizierte Objekte der Klassen x_{1-N}) durch die Gesamtzahl aller Objekte der Klassen x_{1-N} .
<i>Genauigkeit</i> (engl. <i>precision</i>)	Quotient aus der Anzahl der richtig klassifizierten Objekte einer Klasse x_1 und der Gesamtanzahl der Objekte aller Klassen x_{1-N} , die vom Klassifikator in diese Klasse x_1 eingeteilt wurden.
<i>Sensitivität</i> (engl. <i>recall</i>)	Quotient aus dem Anteil der richtig klassifizierten Objekte einer Klasse x_1 zur Gesamtheit aller Objekte dieser Klasse x_1 .
<i>kappa-Wert</i>	Quotient aus den korrekt klassifizierten Objekten minus einem zufälligen Ergebnis und der Differenz von einer perfekten Vorhersage (= 1) und einem zufälligen Ergebnis (engl. random prediction).

Die Genauigkeit gibt an, wie viele Objekte einer Klasse x_1 richtig klassifiziert wurden, in Bezug auf alle Objekte, die durch den Klassifikator in die Klasse x_1 eingeteilt wurden. Ein niedriger Wert für die Genauigkeit bedeutet, dass viele Objekte aus den anderen Klassen als Objekt der Klasse x_1 klassifiziert wurden. Die Sensitivität gibt an, wie viele Objekte der Klasse x_1 vom Klassifikator richtig in die Klasse x_1 eingeteilt wurden. Ein niedriger Wert bedeutet, dass viele Objekte der Klasse vom Klassifikator in eine andere Klasse eingeteilt wurden.

Der *kappa*-Wert ist ein Maß für die Güte und Gesamtgenauigkeit einer Klassifizierung [180]. Der *kappa*-Wert wird anhand aller Einträge der Matrix berechnet und liegt im Wertebereich zwischen 0 und +1, wobei +1 eine perfekte Übereinstimmung des Klassifizierungsergebnisses mit der Grundwahrheit (engl. ground truth) anzeigt. Werte von 0 zeigen, dass die Leistung des Modells einem zufälligen Ergebnis entspricht [181]. Die Einteilung des *kappa*-Wertes zur Beurteilung der Güte der Klassifizierung nach Oritz et al. ist in Tabelle 2.17 gezeigt [176].

Tabelle 2.17: Einteilung des *kappa*-Wertes nach Oritz et al. [176].

<i>kappa</i> -Wert	Güte der Klassifizierung
< 0,0	sehr schlecht
0,0 – 0,2	schlecht
0,2 – 0,4	akzeptabel
0,4 – 0,6	gut
0,6 – 0,8	sehr gut
0,8 – 1,0	exzellent

Mit Hilfe der aus der Konfusionsmatrix berechneten Kennwerte kann zum einen die Klassifizierungsleistung unterschiedlicher Modelle miteinander verglichen werden, zum anderen ermittelt werden, ob das Modell alle Klassen gleichwertig klassifizieren kann.

3 Präzisierte Aufgabenstellung

Die vorliegende Arbeit hat das Ziel, im Bereich der Gefügeklassifizierung von niedriglegierten Stählen, neue Ansätze und Lösungsvorschläge auf der Basis der Methoden des maschinellen Lernens zu liefern. Als Methode wird das Stützvektorverfahren (SVM) angewendet, welches großes Potential für Klassifizierungsansätze von Gefügen besitzt.

Die große Herausforderung für zweiphasige Stahlgefüge, wie sie in der vorliegenden Arbeit verwendet werden (Ferritmatrix und ein weiterer Gefügebestandteil), besteht darin, dass sowohl die Phasenstruktur als auch die Substruktur entscheidend für die Klasse sind. Der Großteil der bereits existierenden Klassifizierungsansätze, mit Ausnahme der Vorarbeiten von Harste [182] und Britz [183], basieren auf der Nutzung von LIM- oder REM-Aufnahmen. Traditionell werden zur Klassifizierung aus Effizienzgründen vor allem LIM-Aufnahmen verwendet. Typische Substrukturen von Stählen liegen jedoch in einer Größenordnung, welche lichtmikroskopisch nicht mehr vollständig aufgelöst werden kann. Zur Beurteilung der Substruktur und zur Unterscheidung der Gefügebestandteile ist es sinnvoll REM-Aufnahmen mit höherer Auflösung zu nutzen. Die Abgrenzung der Bereiche verschiedener Gefügebestandteile von zweiphasigen Gefügen ist in REM-Aufnahmen schwierig, kann aber in LIM-Aufnahmen durch eine angepasste Ätzung sehr gut erfasst werden. Aus diesem Grund verwendet der Ansatz der vorliegenden Arbeit im Gegensatz zu den meisten bestehenden Klassifizierungsansätzen (Tabelle 2.15) zum Aufbau einer Datenbasis beide Aufnahmequellen (korrelative Mikroskopie).

In der vorliegenden Arbeit wird untersucht, welche Merkmale aus korrelativen Mikroskopaufnahmen für eine Gefügeklassifizierung geeignet sind. Ein Arbeitsablauf für die Extraktion von form- und größenbeschreibenden sowie pixelbasierten Merkmalen wird erarbeitet. Die aus den Vorarbeiten bestehende Datenbasis wird um weitere Bilddaten und Merkmalsgruppen erweitert. Ein Arbeitsablauf für einen Klassifizierungsprozess mittels SVM wird entwickelt und automatisiert. Es werden Möglichkeiten der Datenvorverarbeitung, der Datenaufteilung und der Validierung der SVM-Modelle diskutiert. Abschließend wird die Signifikanz der Merkmale mittels unterschiedlicher Methoden ermittelt und mit den Erscheinungsformen der Gefügebestandteile auf den Mikroskopaufnahmen korreliert.

4 Überblick über den Inhalt und die Verknüpfung der enthaltenen Publikationen

Im folgenden Kapitel werden die drei referierten Publikationen der vorliegenden Arbeit in einem Überblick vorgestellt. Die Manuskripte wurden in internationalen peer-review Zeitschriften veröffentlicht und bieten eine detaillierte Diskussion aller Ergebnisse der Arbeit. Dieses Kapitel zeigt die Verbindung zwischen den oben genannten Publikationen und gibt einen umfassenden Überblick über den entwickelten Data Mining Prozess, die Aufteilung der Daten, die Datenvorverarbeitung, die Auswertung der SVM-Modelle und die entwickelten Gefügeparameter (= Merkmalsdaten) sowie eine Zusammenfassung der wichtigsten Ergebnisse. Eine detailliertere Darstellung aller Ergebnisse, verbunden mit einer ausführlichen Diskussion sowie Informationen über die verwendeten Materialien und Methoden, sind in den beigefügten Publikationen enthalten.

Für die Gefügeklassifizierung von zweiphasigen Stählen mittels SVM wird in der vorliegenden Arbeit eine Datenbasis basierend auf LIM- und REM-Aufnahmen für die drei Klassen Perlit, Bainit und Martensit aufgebaut. Um die Klassen voneinander abzugrenzen, werden für die Klassen Perlit und Martensit ausschließlich typische Gefüge verwendet und in der Klasse Bainit alle in Kapitel 2.1.3 beschriebenen Untergruppen zusammengefasst. Die Klasse Bainit zeigt somit eine große Variation an Strukturen. Die Grundwahrheit (engl. ground truth) und somit die Klasseneinteilung wird von Experten nach dem Klassifizierungsschema des Micro Quant vor der Erstellung der Merkmalsdatenbasis festgelegt. Für jede Klasse werden zur Erstellung des Datensatzes die gleichen Merkmale aus den Mikroskopaufnahmen ausgelesen. Alle Ergebnisse und Diskussionen der vorliegenden Arbeit basieren auf diesem Merkmalsdatensatz. Die aus den Mikroskopaufnahmen ausgelesenen Merkmalsdaten bestehen aus verschiedenen morphologischen und pixelbasierten Parametern (engl. morphological and pixel-based parameters), die die Morphologie und die Substruktur (engl. substructure) der Zweitphasebereiche (in der vorliegenden Arbeit als Objekte bezeichnet, engl. second phase objects) beschreiben.

Die Vorarbeiten von Harste [182] und Britz [183] geben ausführliche Ergebnisse zur Kontrastierung und Bildanalyse niedriglegierter Stähle sowie erste Untersuchungen zur

Klassifizierung mittels Data Mining Methoden und bilden die Basis für die entwickelte Methodik der vorliegenden Arbeit. Weitere Untersuchungen der vorliegenden Arbeit im Bereich der Datenanalyse und der Verwendung verschiedener Klassifikatoren sind in [184] zu finden.

4.1 Data Mining Prozess und Datenaufteilung

Zunächst ist der Aufbau eines Data Mining Prozesses sowie eine geeignete Datenvorbereitung notwendig. In der **Publikation I** wird der in der vorliegenden Arbeit entwickelte Prozessablauf vorgeschrieben. Die erhobenen Merkmalsdaten für die drei Klassen werden in zwei Datensätze aufgeteilt (Publikation I, Fig. 2). Der erste Datensatz dient zum Trainieren des Modells (Trainingsdaten, Merkmale für z.B. 80 % der Objekte der Klassen Perlit, Bainit, Martensit) und zur Simulation des Anwendungsfalls (Testdaten, Merkmale für z.B. 20 % der Objekte der Klassen Perlit, Bainit, Martensit). Der entscheidende Punkt zur korrekten Evaluierung der Klassifizierungsergebnisse ist, die Merkmalsdaten bereits vor den Operationen (z.B. der Normalisierung) zu trennen, weil diese Operationen ansonsten einen Einfluss auf die Modellbildung haben. Die Modellbildung erfolgt wie in Kapitel 2.5 beschrieben anhand der höchsten Generalisierbarkeit in Abhängigkeit der Trainingsdaten und der unabhängigen Testdaten. Der entwickelte Prozess besteht sowohl aus dem Trainieren des Modells als auch dem Testen des finalen Modells. Bei der Modellbildung werden die Trainingsdaten zunächst vorverarbeitet und dann die Kombination der Hyperparameter C und γ für die gegebenen Merkmalsdaten, wie in Kapitel 2.5.1 beschrieben, optimiert. Sowohl die Modellbildung als auch die Erfassung aller Ergebnisse werden innerhalb des Prozessablaufes automatisiert durchgeführt. Die Beurteilung der Klassifizierungsleistung des finalen Modells erfolgt anhand der Klassifizierungsgenauigkeit der unbekanntesten Testdaten in Kombination mit den Ergebnissen der Trainingsdaten, dem *kappa*-Wert und der Parameter C und γ .

Um den Einfluss der Datenaufteilung auf die Klassifizierungsergebnisse zu untersuchen, werden drei verschiedene Arten der Datentrennung in der vorliegenden Arbeit durchgeführt und untersucht. In **Publikation I** werden die Daten aller Proben zunächst gemischt und danach 80 % der Daten zum Trainieren und 20 % zum Testen verwendet. Das Verhältnis der Klassen untereinander bleibt in Test- und Trainingsdaten gleich. Nachteilig an dieser Methode ist, dass bei einem großen Ungleichgewicht der Objekte in einer Klasse für die Modellbildung

eine größere Anzahl an Daten für diese Klasse zur Verfügung steht. Dies führt bei der gegebenen Datenbasis zu einer Verzerrung der Klassifizierungsergebnisse und zu einer präziseren Klassifizierung dieser Klasse, wie in **Publikation I** für Martensit gezeigt wird. Die Werte für Martensit sind mit einer Sensitivität von 94,20 % höher als für Perlit mit 77,80 % und Bainit mit 77,30 % (Publikation I, Table 6). Im zweiten Fall werden die Daten innerhalb einer Klasse nach Proben im Verhältnis 1:1 unterteilt. Die eine Hälfte der Proben wird zum Trainieren verwendet und die andere Hälfte zum Testen. Dadurch wird die Vielfalt der Gefüge der verschiedenen Klassen im Training kleiner. Der Vorteil der probenweisen Datenaufteilung besteht darin, dass sie bei ausreichend großer Datenmenge zu Modellen führt, die weniger anfällig für Schwankungen innerhalb einer Klasse sind und eine höhere Generalisierbarkeit aufweisen. Für die genutzte Datenbasis hat sich gezeigt, dass diese Datenaufteilung zu einer deutlichen Reduzierung der Klassifizierungsgenauigkeit führt, zum Beispiel in **Publikation I** für die morphologische Parametergruppe von ca. 15 % (in absoluten Zahlen von 84,8 % (Table 3, Dataset 1) auf 72,02 % (Table 7, Dataset 1*)). Außerdem verringert sich die Anzahl der Daten im Training bei dieser Aufteilung um ca. 30 %. Die für eine Klassifizierung notwendige Variantenvielfalt innerhalb einer Klasse mit ausreichend großer Datenmenge scheint auf den basierenden Daten nicht mehr gegeben. In **Publikation III** steht mit 11091 Objekten im Vergleich zu **Publikation I** mit 2586 Objekten eine große Datenmenge zur Verfügung. Die Daten für das Training werden gemischt und so aufgeteilt, dass jede Klasse die gleiche Anzahl von Objekten (1100 Objekte pro Klasse) enthält. Die Anzahl der Trainingsdaten ist in der gleichen Größenordnung wie bei der 80:20 Datenaufteilung in **Publikation I**. Die Werte für die Sensitivität sind bei dieser Aufteilung der Testdaten in allen drei Klassen mit 96,88 % für Perlit, 96,48 % für Martensit und 97,41 % für Bainit ausgewogen (Publikation III, Table 8).

Zusammenfassend lässt sich schlussfolgern, dass bei der gegebenen Datenbasis sowohl die Anzahl der Objekte pro Klasse als auch deren Aufteilung einen großen Einfluss auf die Modellbildung haben. Unausgewogene Daten für die verschiedenen Klassen haben im Training höhere Genauigkeiten für die Klasse mit den meisten Daten. Weiterhin ist die Anzahl der Gesamtsamtdaten entscheidend, wie bei einer Verkleinerung des Datensatzes im Training der probenweisen Datenaufteilung gezeigt werden konnte. Die besten Ergebnisse können für ausgeglichene Klassen im Training mit größtmöglicher Anzahl an Daten erreicht werden.

4.2 Datenvorverarbeitung

Neben der Datenaufteilung wird in **Publikation I** erläutert, dass zusätzlich zu einer Normalisierung weitere Schritte in der Datenvorverarbeitung wichtig sind. Eine Normalisierung ist unbedingt notwendig bei der Modellbildung mittels SVM, wenn die verschiedenen Parameter des Merkmalsdatensatzes verschiedene Skalenbereiche aufweisen, da dadurch die Länge der Stützvektoren und die Klassifizierung beeinflusst werden, wie in Kapitel 2.5.2 beschreiben. In Vorarbeiten zu **Publikation I** [184] werden die verschiedenen Methoden der Datennormalisierung, wie in Kapitel 2.5.2 vorgestellt, untersucht mit dem Ergebnis, dass sich sowohl die Standardisierung als auch die Interquartile-Range-Transformation und die Range-Transformation für die Stützvektormethode in Kombination mit dem gegebenen Merkmalsdatensatz eignen. Es kann für die Standardisierung und die Interquartile-Range-Transformation kein großer Einfluss der Art der Normalisierung auf die Klassifizierungsergebnisse ($< 1\%$) festgestellt werden. Die Range-Transformation zeigt niedrigere Ergebnisse mit ca. 5 % Abweichung. Die Ergebnisse sind in [184] zu finden. Für alle Versuche der vorliegenden Arbeit wurde die Standardisierung verwendet, da diese im Vergleich zu den Range-Transformationen nicht die minimalen und maximalen Werte der Merkmale betrachtet und somit weniger anfällig für Ausreißer in den Daten ist.

Ein wichtiger Aspekt für die Modellbildung ist, die Merkmale der Trainingsdaten getrennt von den der Testdaten zu normalisieren, da sonst die Werte der Merkmale der Testdaten die Normalisierung beeinflussen und das Modell bereits Informationen aus den Testdaten erhält. Für eine erfolgreiche Simulation des Anwendungsfalls ist es von zentraler Bedeutung, dass die Merkmale der Testdaten mit dem Normalisierungsmodell der Trainingsdaten normalisiert werden. Der Grund dafür ist, dass das Modell auf der Basis dieser Wertebereiche angepasst ist. Wenn der Wertebereich der Merkmale in den Testdaten weit von den Werten in den Trainingsdaten abweicht, könnte eine separate Normalisierung die Ergebnisse beeinflussen. Im entwickelten Prozess wird hierfür ein Normalisierungsmodell anhand der Trainingsdaten erstellt, welches beim Testen auf die neuen unbekanntenen Daten angewendet wird. Ausreißer, die außerhalb des Wertebereichs der Normalisierung sind, stellen für ein SVM-Modell keine Schwierigkeit dar.

Ein weiterer für die Normalisierung wichtiger Punkt stellt die Verteilung der Werte eines Merkmals dar. Es hat sich gezeigt, dass die Verteilungen der morphologischen Parameter zu kleinen Werten verschoben sind und schiefe Formen aufweisen [184]. In **Publikation I** ist beschrieben, dass eine logarithmische Transformation der morphologischen Parameter mit schiefer Verteilung einen positiven Einfluss auf das Klassifizierungsergebnis, mit einer Steigerung der Genauigkeit um bis zu 3 % im Vergleich zu den Originalwerten (z.B. Table 3), zeigt. Für die pixelbasierten Texturparameter können diese Beobachtungen in den Vorversuchen nicht gemacht werden [184]. Es ist nicht davon auszugehen, dass eine ungleichmäßige Datenverteilung einen Einfluss auf die Modellbildung mittels Stützvektorverfahrens hat. Die Verbesserung in der Klassifizierungsgenauigkeit könnte in diesem Fall auf den verwendeten RBF-Kernel zurückzuführen sein. Die Nutzung eines festen γ -Wertes nach der Optimierung könnte bei nicht gleichverteilten Daten zu einer Diskrepanz zwischen Bereichen hoher und niedriger Datendichte führen.

Bei der Datenvorbereitung sollte für eine erfolgreiche Modellbildung unter der Nutzung von morphologischen Parametern die Schiefverteilung der Messwerte beachtet und korrigiert werden. Außerdem ist eine Datenvisualisierung zur Detektion von Ausreißern vor der Normalisierung sinnvoll. Bei der Normalisierung sollte vor allem darauf geachtet werden, dass die richtige Normalisierungsmethode ausgewählt wird und dass auf die Merkmale der unabhängigen Testdaten das Normalisierungsmodell der Trainingsdaten angewendet wird, da mit diesen der reale Klassifizierungsfall für die Beurteilung des Modells simuliert wird.

4.3 Auswertung der SVM-Modelle

Die Auswertung der Klassifizierungsergebnisse und die Aussagen über die Generalisierbarkeit der SVM-Modelle erfolgt über die in Kapitel 2.5.3 vorgestellte Konfusionsmatrix. Aus dem in der vorliegenden Arbeit entwickelten Data Mining Prozess können, wie in **Publikation I** beschreiben, verschiedene Ergebnisse für ein Klassifizierungsmodell ermittelt werden.

Bei der Modellbildung werden die Trainingsdaten mit der Methode der Kreuzvalidierung in fünf Teile aufgeteilt. Von diesen fünf Teildatensätzen werden vier genutzt, um das Modell mit einer bestimmten Kombination der SVM-Parameter C und γ zu erstellen. Der fünfte Teil wird zum Validieren des Modells genutzt. Für eine Parameterkombination werden somit 4 Modelle erstellt und der Mittelwert der Validierungsdaten als Klassifizierungsergebnis (x-validation

performance) ausgegeben. Jedes erstellte Modell wird zusätzlich mit allen Trainingsdaten (training performance) als auch mit den Testdaten (test performance) auf Generalisierbarkeit überprüft (Publikation I, Fig. 2). Für die Parameterkombination, die das Modell mit der höchsten Generalisierbarkeit erzeugt, wird mit allen Trainingsdaten das finale Modell trainiert. Für das finale Modell werden die drei beschriebenen Klassifizierungsergebnisse gespeichert und zur Auswertung der Modelle verwendet (Publikation I, Fig. 2).

Der entwickelte Arbeitsablauf ermöglicht die Beurteilung der Modelle auf der Basis der Klassifizierungsergebnisse der unabhängigen Testdaten, die den Anwendungsfall simulieren in Kombination mit den Klassifizierungsergebnissen der Trainingsdaten, dem *kappa*-Wert und der gewählten Parameter C und γ . In den Vorarbeiten sind die Modelle anhand der Ergebnisse der Kreuzvalidierung beurteilt [182],[183]. Die Ergebnisse der Kreuzvalidierung ermöglichen eine Abschätzung der Aussagekraft eines Modells, sind allerdings nicht sensitiv für die Detektion einer Überanpassung (Kapitel 2.5.3). Aus diesem Grund ist der Prozessablauf in der vorliegenden Arbeit, wie oben beschreiben, weiterentwickelt.

Vor allem für den Vergleich von verschiedenen Modellen sind mehrere Kriterien sinnvoll, wie in den **Publikationen I** und **III** gezeigt. In diesen werden die verschiedenen Klassifizierungsmodelle zunächst anhand der Ergebnisse der unabhängigen Testdaten beurteilt. Als weiteres Kriterium wird bei gleicher Klassifizierungsgenauigkeit der Testdaten die Genauigkeit der Trainingsdaten im Vergleich zu den Testdaten genutzt, wie in **Publikation III** (Fig. 3) gezeigt. Zusätzlich wird die Klassifizierungsgüte durch den *kappa*-Wert zur Auswertung der Modelle genutzt und ebenfalls die Komplexität der Modelle anhand der Parameter C und γ beurteilt.

Es hat sich gezeigt, dass für die Bewertung der Klassifizierungsmodelle die Nutzung mehrerer Kriterien sinnvoll ist, vor allem für eine Vergleichbarkeit unterschiedlicher Modelle und zur Detektion einer Überanpassung.

4.4 Methoden zur Merkmalsauswahl

Weiterhin ist die Auswahl der signifikanten Merkmale von entscheidender Bedeutung. Hierfür stehen verschiedene Methoden, wie in Kapitel 2.5.2 vorgestellt, zur Verfügung. Die Anzahl der Merkmale ist verbunden mit der Komplexität des SVM-Modells. Diese kann mit der

Auswahl der signifikanten Merkmale verringert werden. In **Publikation I** und in **Publikation III** wird zunächst eine Korrelationsanalyse an den Merkmalsdaten durchgeführt. Alle Merkmale, die Korrelationen größer als 0,95 aufweisen werden aus dem Datensatz entfernt. Nach der Korrelationsanalyse sind von den pixelbasierten Parametern noch alle Parameter vorhanden und von den morphologischen Parametern mehr als die Hälfte entfernt worden (Publikation III, Table 3, Dataset 3), was den großen Vorteil der pixelbasierten Parameter verdeutlicht.

Die signifikanten Merkmale werden in **Publikation I** mit der Methode der Rückwärtsauswahl detektiert. Diese Methode hat sich für eine kleinere Anzahl von Merkmalen (z.B. 15 Merkmale in **Publikation I** bestehend aus morphologischen Parametern aus LIMU-Aufnahmen und zwei Parametern aus korrelierten Aufnahmen), als geeignet erwiesen. Nach der Reduktion der Merkmale zeigt das SVM-Modell basierend auf 10 morphologischen Parametern eine Klassifizierungsgenauigkeit in der gleichen Größenordnung wie für 27 morphologische Parameter (Publikation I, Table 3 und 5). Die Komplexität des Modells kann jedoch deutlich reduziert und somit die Generalisierbarkeit erhöht werden. In **Publikation III** ist die Merkmalsauswahl aufgrund der großen Anzahl von Merkmalen (29 Merkmale bestehend aus den drei Merkmalsgruppen, morphologische Parameter, Substrukturparameter und Texturparameter) mit einem evolutionären Algorithmus durchgeführt. Die Anzahl kann dadurch bei gleichbleibender Klassifizierungsgenauigkeit auf 16 Merkmale reduziert werden (Publikation III, Table 3, Dataset 4).

Nach der Auswahl der signifikanten Merkmale wird eine Gewichtung mittels Filtermethoden durchgeführt und die Wertigkeit einzelner Merkmale für die Klassifizierung mit den Mikroskopaufnahmen korreliert. **Publikation III** zeigt die systematische Verkleinerung des Merkmalsdatensatzes nach Anwendung der verschiedenen Methoden und die Auswirkungen auf die Modellbildung (Publikation III, Table 3).

Die Ergebnisse demonstrieren, dass bei der Auswahl der signifikanten Merkmale die Kombination aus unterschiedlichen Auswahlmethoden zu einer Verbesserung der Klassifizierungsmodelle führt und somit die Detektion signifikanter Merkmale ermöglicht.

4.5 Signifikanz der Merkmale

Die verschiedenen Merkmalsgruppen, die die Datenbasis für die Klassifizierung in der vorliegenden Arbeit bilden, werden aus unterschiedlichen korrelativen Mikroskopaufnahmen ausgewertet und sind in den **Publikation I** und **II** vorgestellt. Insgesamt wird die Bedeutung von drei verschiedenen Merkmalsgruppen für die Klassifizierung untersucht (Publikation III, Table 2). Die erste Gruppe erfasst die Morphologie der Zweitphaseobjekte von binarisierten LIMU-Aufnahmen (morphologische Parameter, engl. morphological parameters), die zweite die pixelbasierte Bildtextur der Substruktur dieser Objekte aus REM-Aufnahmen (Texturparameter, engl. textural features) und die dritte Gruppe die morphologischen Unterschiede der binarisierten Substruktur aus REM-Aufnahmen (morphologische Substrukturparameter, engl. substructure parameters).

4.5.1 Morphologische Parameter

Die Methoden zum Erstellen der binären Messbilder und die Messung der morphologischen Parameter der Zweitphaseobjekte werden in der **Publikation I** und in Britz et al. [36] beschrieben. Aus segmentierten LIMU-Aufnahmen werden traditionelle Gefügeparameter ausgewertet und formbeschreibende Parameter berechnet (wie in Kapitel 2.2.3 beschrieben). Zusätzlich sind zwei Merkmale zu dieser Merkmalsgruppe hinzugefügt, die Informationen von REM-Aufnahmen und somit der Substruktur der Zweitphaseobjekte enthalten. Das erste Merkmal repräsentiert die Dichte der Substruktur innerhalb eines Objekts und das zweite das Grauwertverhältnis (Publikation I, Table 1).

Nach der Merkmalsreduktion und der Gewichtung der 10 signifikanten Merkmale weisen die beiden zusätzlichen Merkmale, die bereits Informationen über die Substruktur enthalten, die höchste Relevanz auf (Publikation I, Table 4). Außerdem zeigt die Signifikanzanalyse, dass sowohl formbeschreibende Parameter, wie das Achsenverhältnis bzw. Feretverhältnis, als auch Merkmale, die die absolute Größe von Objekten beschreiben, wie der Durchmesser oder die kleinste Achse der umschließenden Ellipse, entscheidend für die Klassifizierung sind. Dieses Ergebnis wird in **Publikation III** bestätigt, da nach der evolutionären Merkmalsreduktion die Gruppe der morphologischen Parameter noch zu einem Drittel im Datensatz enthalten ist (Publikation III, Table 3 und 4). Mit den signifikanten 10 morphologischen Parametern kann in **Publikation I** (Table 6) eine Klassifizierungs-

genauigkeit von 87,15 % auf unabhängigen Testdaten erreicht werden. Die Klassifizierung von Martensit zeigt mit 94,20 % den höchsten Sensitivitätswert für richtig klassifizierte Objekte im Vergleich zu Perlit (77,80 %) und Bainit (77,30 %). Es ist zu erkennen, dass perlitische und bainitische Objekte vermehrt als Martensit klassifiziert werden. Ein Grund dafür ist, dass bei kleinen Objekten die Morphologie der Phasenbereiche auf mikroskopischen Aufnahmen nicht mehr eindeutig für die Klasse ist. Die für eine Klasse typische Substruktur ist oftmals nicht ausreichend abgebildet (Publikation I, Fig. 7). Die morphologischen Parameter mit Substrukturdichte und Grauwertverhältnis erhalten für diese Objekte ähnliche Werte für alle drei Klassen. Im Vergleich dazu zeigen Objekte mit größeren Flächen eine typische Erscheinungsform der Klasse und erleichtern somit eine Klassifizierung. Weiterhin besteht die Klasse Martensit aus einer größeren Datenmenge als die anderen beiden Klassen, was die höheren Klassifizierungsgenauigkeiten der Martensit-Objekte erklärt.

Die Gruppe der morphologischen Parameter weist hohe Korrelationen zwischen den Merkmalen auf, wie in **Publikation III** (Table 3) gezeigt wird. Von den 23 morphologischen Parametern weisen nach der Korrelationsanalyse 9 Parameter eine Abhängigkeit kleiner 0,95 auf.

Die Ergebnisse verdeutlichen die Notwendigkeit von Merkmalen, die die Substruktur beschreiben. Aus diesem Grund wird in **Publikation I** die Gruppe der morphologischen Substrukturparameter basierend auf der binarisierten Ätzstruktur der Objekte aus den REM-Aufnahmen eingeführt.

4.5.2 Morphologische Substrukturparameter

Die morphologischen Substrukturparameter werden aus der über die Schwellwertmethode binarisierten Ätzstruktur der REM-Aufnahmen gewonnen und sind ein statisches Mittel der inneren Morphologie eines Objektes. Für jedes individuelle Teilchen werden die morphologischen Parameter gemessen und von der logarithmischen Verteilung der Mittelwert und die Standardabweichung als Daten bestimmt (Publikation I, Fig. 5 und 6). Diese Gruppe weist ebenfalls eine hohe Korrelation der Merkmale untereinander auf (Publikation III, Table 3). Nach der Analyse in **Publikation III** sind noch 12 von 44 Substrukturparametern im Datensatz enthalten. Vergleichbar zu den morphologischen Parametern der Objekte aus den LIMI-Aufnahmen zeigt **Publikation III** für die morphologischen Substrukturparameter, dass

größenabhängige und formabhängige Parameter wichtig sind und diese Merkmalsgruppe eine hohe Relevanz für die Klassifizierung aufweist (Publikation III, Table 4).

Für die Gruppe der Substrukturparameter kann in **Publikation I** (Table 8) mit 10 Merkmalen eine Klassifizierungsgenauigkeit von 88,33 % erreicht werden. Mit diesen Merkmalen sind die Sensitivitätswerte für Martensit 90 % und Perlit 100 % sehr gut, sodass eine gute Unterscheidung der beiden Klassen erreicht wird. Die Klasse Bainit zeigt eine niedrigere Sensitivitätsrate von 75 %. Eine Erklärung dafür könnte die Variantenvielfalt sein, da in dieser Klasse alle bainitische Strukturen zusammengefasst sind. Bainit tritt jedoch, wie in Kapitel 2.3.2 erläutert, in einer Vielzahl von Erscheinungsformen mit teilweise unterschiedlicher Morphologie auf. Dadurch ist die Generalisierbarkeit des Modells in Bezug auf die Klasse Bainit noch nicht ausreichend.

Zu einer besseren Unterscheidung von Bainit und Martensit ist es aus diesem Grund notwendig weitere Merkmale der Datenbasis hinzuzufügen, welche eine bessere Trennung dieser Klassen ermöglichen. Da der pixelbasierte Parameter Grauwertverhältnis in **Publikation I** (Table 4) nach Auswertung der Signifikanz eine hohe Wichtigkeit für die Unterscheidung der Klassen zeigt, werden weitere pixelbasierte Parameter auf ihre Eignung untersucht.

4.5.3 Pixelbasierte Parameter

Pixelbasierte Parameter, die bereits in anderen Klassifizierungsansätzen in Tabelle 2.15 genutzt werden, sind die von Haralick entwickelten GLCM-Parameter (Tabelle 2.2). Die traditionellen GLCM-Parameter zeigen eine hohe Abhängigkeit von der Ausrichtung der Struktur, da sie für die Auswertung die Pixelnachbarschaften in wenigen ausgewählten Richtungen (0° , 90° , 45° und 135° , Kapitel 2.2.3) betrachten. Auf den Mikroskopaufnahmen finden sich Zweitphaseobjekte deren Substrukturen verschiedene Ausrichtungen haben. Damit diese Strukturen richtungsunabhängig detektiert werden können, werden die GLCM-Parameter zu den richtungsunabhängigen Amplitudenparametern (engl. amplitude values) modifiziert. Eine systematische Auswertung der GLCM-Amplitudenparameter Energie, Korrelation, Homogenität und Kontrast wird in **Publikation II** vorgestellt.

Die GLCM-Parameter werden bei dieser Methode nicht nur einmal pro Objekt berechnet, sondern für jedes Objekt 180-mal. Die Objekte werden dafür in 1 Grad Schritten gedreht und

jeweils die GLCM-Parameter berechnet. Aus allen 180 Werten wird dann der Amplitudenwert kalkuliert, in dem vom größten gefundenen Wert der 180 Berechnungen der kleinste Wert subtrahiert wird. Nach der Auswertung der Amplitudenwerte zeigt beispielsweise der Amplitudenparameter Korrelation hohe Werte für gerichtete Strukturen, wie sie in perlitischen Gefügen nach einer Ätzung vorliegen. Im Vergleich dazu haben bainitische und martensitische Gefügebestandteile, die weniger gerichtete Strukturen zeigen, niedrigere Amplitudenwerte (Publikation II, Fig. 5). Für bainitische Strukturen werden Korngrenzen beim Ätzen nicht so stark angegriffen wie die fein verteilten Karbide, welche sehr hell in REM-Aufnahmen erscheinen. Aus diesem Grund weist die Textur weniger gerichtete Strukturen auf, was zu kleineren Werten bei den Amplitudenparametern führt. Martensitische Strukturen weisen Werte zwischen denen des Perlits und des Bainits auf, sodass die Amplitudenparameter eine Unterscheidung aller drei Klassen erlauben. In **Publikation II** wird die neu entwickelte Methode vorgestellt und die Ergebnisse werden mit dem etablierten Mittelwert verglichen (Publikation II, Fig. 7). Die Amplitudenparameter erreichen für quadratische Bildausschnitte der drei Gefügebestandteilklassen eine bessere Unterscheidung als der traditionelle Mittelwert. Als besonders vorteilhaft erweist sich die neue Methode bei der Unterscheidung von Martensit und Bainit. Mittels der Amplitudenparameter können auf den Modellbildern signifikante Unterschiede für die beiden Klassen gefunden werden, welche auch bei niedrigeren Auflösungen und Helligkeitsunterschieden noch zu erkennen sind (Publikation II, Fig. 9 und Fig. 10). Die Unterscheidbarkeit kann bei der Betrachtung der Parameter von ganzen Objekten ebenfalls detektiert werden, ist jedoch nicht so ausgeprägt wie bei den quadratischen Modellbildern (Publikation II, Fig. 8). Der Grund hierfür ist, dass man bei der Betrachtung ganzer Zweitphaseobjekte eine Vielfalt an Varianten von Objektgröße und -form erhält und somit eine ungleichmäßige Pixelanzahl. Außerdem ist die für die Klasse charakteristische Substruktur für kleine Objekte, wie in Kapitel 4.5.1 beschrieben, nicht immer vollständig ausgebildet. Dadurch können auf mikroskopischen Aufnahmen ähnliche Erscheinungsformen der Substruktur für unterschiedliche Klassen auftreten und dadurch ähnliche Bildtexturmuster entstehen. Die Klassifizierungsergebnisse der pixelbasierten Parametergruppe bestehend aus den Amplituden- und Mittelwerten in **Publikation III** (Table 6) zeigen auf unabhängigen Testdaten 85,77 % Genauigkeit mit acht Parametern und befinden sich damit in der gleichen Größenordnung wie die Klassifizierungsergebnisse der morphologischen Merkmalsdaten. Ein großer Vorteil der

GLCM-Parameter im Vergleich zu den morphologischen Parametern besteht darin, dass sie keine Korrelation größer als 0,95 aufweisen, wie in **Publikation III** (Table 3) gezeigt ist.

Die Ergebnisse der verschiedenen Merkmalsgruppen in **Publikation I** und **III** zeigen, dass alle Gruppen vergleichbare Klassifizierungsergebnisse (87,15 % für die morphologischen Parameter der Objekte, 88,33 % für die Morphologie der Substruktur und 85,77 % für die GLCM-Parameter) erreichen können und somit charakteristische Merkmale für eine Unterscheidung der Klassen enthalten. Um die Klassifizierungsgenauigkeit zu erhöhen werden die Merkmalsgruppen im Folgenden kombiniert und die signifikante Parameterkombination aller Gruppen ermittelt.

4.5.4 Kombination der Merkmalsgruppen

Für eine umfassende Charakterisierung von Gefügen werden korrelative Ansätze verschiedener Messmethoden bereits standardmäßig verwendet. Im Bereich der Gefügeklassifizierung werden bisher, wie aus Tabelle 2.15 ersichtlich, entweder LIM- oder REM-Aufnahmen für die Klassifizierungsansätze verwendet. Um den Mehrwert der korrelativen Mikroskopie auch für die Klassifizierung zu nutzen werden die vorgestellten Merkmale, welche aus LIM-, REM-Aufnahmen oder einem kombinierten Bild bestehen für den Aufbau der Merkmalsdatenbank genutzt (**Publikation III**). Hierzu ist es wichtig, dass alle eingeführten Merkmale eines Objektes erfasst und diesem Objekt zugeordnet werden können. Zur Erstellung dieser Datenbank war es notwendig eine Methodik zu entwickeln, die es ermöglicht die gleiche Probenstelle im LIM und im REM aufzunehmen, wie in **Publikation I** und **Publikation II** beschrieben, und die Aufnahmen danach zu registrieren [36]. Außerdem musste ein eigenes MATLAB®-Programm zur Datenerzeugung aufgebaut werden.

Die Ergebnisse in **Publikation III** (Table 8) zeigen, dass durch die Kombination der Merkmalsgruppen eine signifikante Steigerung der Klassifizierungsgenauigkeit auf 97,04 % mit 16 Merkmalen erreicht werden kann. Außerdem wird geprüft, wie sich die Auswahl der signifikanten Merkmale und damit die Reduktion des Merkmalsdatensatzes auf die Klassifizierungsgenauigkeit auswirken. Die Ergebnisse der Auswahl der signifikanten Merkmale verdeutlichen, dass alle drei Gruppen für die Klassifizierung von Gefügen wichtig sind, da nach der evolutionären Merkmalsauswahl im Datensatz noch alle drei Gruppen enthalten sind (Publikation III, Table 3 und Table 4). Darüber hinaus kann festgestellt werden,

dass die Merkmalsgruppen mit fünf pixelbasierten Parametern der Substruktur, fünf morphologischen Parametern für die Objekte und sechs für die Substruktur jeweils etwa zu einem Drittel noch im Datensatz enthalten sind. Dies zeigt, dass alle drei Gruppen eine gleich große Relevanz für den Klassifizierungsansatz besitzen.

Die Gewichtung der 16 wichtigsten Merkmale in **Publikation III** (Table 4) weist darauf hin, dass Merkmale, die die Bildtextur beschreiben, eine höhere Bedeutung haben als morphologische Objektparameter. Die signifikanten morphologischen Parameter zeigen sowohl form- als auch größenbezogene Parameter für Objekte und für die Substruktur. Diese Gefügeparameter können mit dem Erscheinungsbild der Zweitphaseobjekte auf den mikroskopischen Aufnahmen korreliert und somit ihre Signifikanz bestätigt werden. So erscheinen beispielsweise, in der für die vorliegende Arbeit verwendeten Datenbasis, martensitische Objekte oft in langgestreckter Form im Vergleich zu den bainitischen Strukturen des Datensatzes (granularer Bainit), welche eher uniaxiale Formen aufweisen (Publikation I, Fig. 4). Die Morphologie der Substruktur zeigt ebenfalls morphologische Unterschiede, die mit verschiedenen Größen- und Formparametern korreliert werden können. Beispielsweise besteht die innere Struktur des Bainits in den ausgewählten Daten meist aus runden Einzelpartikeln, während die martensitischen Bereiche nach Ätzung netzwerkartige Strukturen aufweisen (Publikation I, Fig. 6 und Publikation III, Fig. 4). Diese Netzwerke enthalten viele Hohlräume und unregelmäßige Formen, was Parameter wie z.B. die Rundheit beeinflusst.

Bei den pixelbasierten Merkmalen zeigen drei Amplitudenparameter für Korrelation, Kontrast und Energie sowie die Mittelwerte der Homogenität und Energie eine hohe Relevanz (Publikation III, Table 4). Die Korrelation der Merkmale mit der Bildtextur der Gefügekassen kann, wie in Kapitel 4.5.3 erläutert, durch die Anordnung der unterschiedlichen Grauwerte in der Gefügaufnahme erfolgen. Die Ergebnisse der Merkmalsauswahl bestätigen die in **Publikation II** ermittelte Relevanz der Amplitudenparameter. In **Publikation II** (Fig. 7) kann beispielsweise für die Amplitude der Korrelation und des Kontrastes eine hohe Trennbarkeit der Substrukturen der drei Klassen Martensit, Perlit und Bainit auf quadratischen Bildausschnitten gefunden werden. Nach der Signifikanzanalyse und der Gewichtung der Merkmale zeigen diese Amplitudenwerte im Klassifizierungsansatz ebenfalls eine hohe Wichtigkeit.

4.6 Zusammenfassung und Ausblick

In der vorliegenden Arbeit konnte erfolgreich ein Konzept zur Gefügeklassifizierung niedriglegierter Stähle mittels SVM anhand einer Kombination von form- und größenbeschreibenden sowie pixelbasierten Merkmalen etabliert werden. Der Ansatz nutzt zur Datenerzeugung sowohl die Morphologie aus LIMU-Aufnahmen als auch die Substruktur aus REM-Aufnahmen. Die besten Ergebnisse konnten mit der LibSVM unter Verwendung des RBF-Kernels und einer Selektion der signifikanten Merkmale aus verschiedenen Merkmalsgruppen erzielt werden. Durch die Erweiterung der Merkmalsdaten mit den Substrukturparametern über die registrierten REM-Aufnahmen konnte eine deutliche Verbesserung der Klassifizierung erreicht werden. Die Klassifizierungsergebnisse der vorliegenden Arbeit von bis zu 97 % für die aufgebaute Datenbasis liegen in der Größenordnung der Klassifizierungsergebnisse in Tabelle 2.15.

Das manuelle Vorklassifizieren der Gefüge, welches bei den überwachten Lernverfahren zur Erstellung der Grundwahrheit der Modelle notwendig ist, ist abhängig von der initialen Bewertung menschlicher Experten. Dieser Aspekt sollte aus diesem Grund auch in Zukunft näher beleuchtet werden, da dieser Punkt bei der Anwendung eine Schwachstelle des gesamten Systems darstellen kann. Eine Möglichkeit diese Schwachstelle zu minimieren, wäre eine Datenbasis zu erzeugen, deren Beurteilung eindeutiger ist. Dies könnte über eine gezielte Herstellung von Referenzproben mit eindeutigen Gefügen, beispielsweise über Dilatometrie, realisiert werden. Besonders interessant wären Referenzproben im Bereich bainitischer Gefüge, aufgrund der vielfältigen Erscheinungsformen dieses Gefügebestandteils. Als eine alternative, benutzerunabhängigere Möglichkeit der Klassentrennung könnten, nach der Herstellung von Referenzproben, die Methoden des unüberwachten Lernens genutzt werden (engl. unsupervised learning [121],[185]). Klassengrenzen könnten mit Hilfe dieser Methoden anhand von Clustern detektiert und somit eine objektivere Klasseneinteilung zur Vorklassifizierung etabliert werden.

Im Vergleich zu Deep Learning Methoden bietet der in der vorliegenden Arbeit gezeigte Klassifizierungsansatz die Möglichkeit der Korrelation der signifikanten Merkmalsdaten mit den Erscheinungsformen der Gefüge auf mikroskopischen Aufnahmen. Dies macht die Modellbildung für den Menschen erklärbar und nachvollziehbar. Außerdem besteht durch die

Detektion der signifikanten Merkmale die Chance diese für weitere Auswertungen und Korrelationen zu nutzen. Dieser Aspekt kann zum besseren Verständnis von Gefüge-Eigenschaftskorrelationen beitragen und stellt aus materialwissenschaftlicher Sicht den großen Mehrwert dieses Ansatzes im Vergleich zu Deep Learning Ansätzen dar. Bei den Deep Learning Ansätzen, wie in Kapitel 2.4.2 beschrieben, wird die Merkmalsauswahl durch die Netze selbst durchgeführt. Diese Merkmale sind hochdimensional und abstrakt, sodass sie für den Menschen nicht mehr verständlich und erklärbar sind. Eine Korrelation der Merkmale mit den Gefügebildungen und weiteren Messdaten ist somit nur eingeschränkt möglich. Deep Learning Modelle zeigen, wie aus Tabelle 2.15 ersichtlich, ein sehr großes Potential für eine Gefügeklassifizierung mit hohen Klassifizierungsgenauigkeiten, stellen jedoch eine „Blackbox“ dar, deren Lernverhalten zum jetzigen Zeitpunkt sehr genau getestet und nur mit großer Vorsicht genutzt werden sollte.

Bei der Erstellung der Merkmalsdaten aus den mikroskopischen Aufnahmen können die Qualität der Probenpräparation und die Mikroskopeinstellungen einen Einfluss auf die gemessenen Merkmale haben. Dies kann sich im anschließenden Klassifizierungsprozess auf die Modellbildung und auf das Klassifizierungsergebnis auswirken. Bei der Wahl neuer Merkmale sollte drauf geachtet werden, dass, wie für die pixelbasierten Amplitudenparameter gezeigt, die Merkmale weitestgehend invariant, z.B. gegenüber Aufnahmeeinstellungen, sind.

Generell stellen Objekte mit sehr kleiner Fläche und nicht eindeutig ausgeprägter Substruktur für verschiedene Gefügebestandteile eine Herausforderung für jede Klassifizierung dar, wie in Kapitel 4.5 beschrieben. Für diese Objekte wäre entweder die Angabe einer Mindestobjektgröße oder die Einbindung und Verknüpfung von weiteren Informationen, wie z.B. einer Mehrheitsentscheidung (engl. majority voting), sinnvoll.

Um die Anwendbarkeit und die Robustheit des Ansatzes weiter zu erhöhen könnten gezielt unterschiedliche Präparationsroutinen und zusätzlich unterschiedliche Kontrastierungen an den gleichen Proben durchgeführt werden. Diese Daten würden für eine größere Variantenvielfalt der Gefügebestandteile in der Merkmalsdatenbank führen. Zusätzlich könnte dadurch der Einfluss von Schwankungen bei der Messung der Gefügemerkmale aufgrund der Aufnahmeeinstellungen weiter reduziert werden.

In diesem Zusammenhang könnten Data Mining und Deep Learning Methoden für die Weiterverarbeitung der mikroskopischen Daten, z.B. im Bereich der Segmentierung von Mikroskopaufnahmen, genutzt werden. Neben dem Nutzen für Klassifizierungsansätze zeigen viele Arbeiten das große Potential dieser Methoden im Bereich der Datenverarbeitung und Datenerzeugung [58],[157],[158]. Diese Ansätze können in Zukunft helfen Strukturen objektiv, reproduzierbar und automatisiert zu segmentieren und dazu beitragen die Merkmalsdaten für die Klassifizierungsansätze noch benutzerunabhängiger zu gestalten.

Weiterhin ist durch die Hinzunahme neuer Merkmalsgruppen und / oder zusätzlicher korrelativer Daten, wie beispielsweise EBSD-basierte Kennwerte, eine Verbesserung der Generalisierbarkeit der Klassifizierungsmodelle zu erwarten. Neue Methoden in der 3D-Analyse können in Zukunft ebenfalls dazu beitragen, die Klassifizierungsansätze zu verbessern. Erste Ansätze dazu wurden in der vorliegenden Arbeit verfolgt, indem beispielsweise eine neue Methodik zur Erstellung einer Substrukturtomographie aus korrelativen LIMI- und REM-Aufnahmen entwickelt wurde [186]. Durch die Korrelation verschiedener mikroskopischer Methoden ist eine Vielzahl an neuen Auswertemethoden möglich, die helfen können die 3D-Gefügestruktur und vor allem deren Konnektivität besser zu verstehen. Bei dem jetzigen Stand der Technik wäre eine 3D-Klassifizierung jedoch mit dem Einsatz von erheblichen zeitlichen und finanziellen Ressourcen verbunden, sodass für die Anwendung in der metallographischen Praxis die 2D-Klassifizierung auch in Zukunft ein wichtiges Werkzeug bleiben wird. Erste 3D-Daten könnten bereits heute zusätzlich genutzt werden, um neue Erkenntnisse über stereologische Beziehungen und Zusammenhänge der Gefüge zu detektieren. Diese Ergebnisse könnten gezielt in die Weiterentwicklung der 2D-Systeme einfließen, indem z.B. signifikante Merkmale in den 3D-Daten für eine Materialklasse ermittelt und diese auf die 2D-Klassifizierung übertragen werden, wie bereits für Klassifizierungsansätze im Bereich Gusseisen gezeigt [140]. Die Tomographien könnten zusätzlich genutzt werden, um künstliche Daten (engl. data augmentation) für die Data Mining Modelle zu generieren und die Datenbanken zu erweitern. Aus der Rekonstruktion komplex geformter Objekte könnten in Simulationsrechnungen jeweils eine beliebige Anzahl an 2D-Schnitten in alle Richtungen und in allen Abständen vom Objektzentrum berechnet und deren Gestalt statistisch ausgewertet werden [140],[187]. Dies bietet die Möglichkeit statistisch abgesicherte Trainingsdaten für Gefügevarianten zu generieren, die seltener in Gefügen vorkommen. Die 3D-Daten könnten als zusätzliche

Information in die Klassifizierungsmodelle eingebracht und dadurch die Klassifizierungssicherheit weiter gesteigert werden. Außerdem könnten durch diese virtuellen Schnitte Daten unabhängig von der Schliffebene erzeugt werden, die ebenfalls zu einer weiteren Objektivierung der Daten beitragen würden.

Die gezeigten Ergebnisse der vorliegenden Arbeit untermauern das Potential des vorgestellten Ansatzes, welcher eine Kombination aus einer Datenbasis basierend auf korrelativen Mikroskopieverfahren und der SVM als Klassifikator ist. Die entwickelte Methodik ist darüber hinaus nicht nur im Bereich der Gefügeklassifizierung von Stählen anwendbar, sondern ist auf mehrphasige Gefüge andere Werkstoffe übertragbar.

Im Bereich niedriglegierter Stähle lässt sich schlussfolgern, dass auf dieser Basis noch weitere umfängliche Arbeiten zum Erreichen des Ziels einer objektiven, verlässlichen, automatischen und vollumfassenden Gefügeklassifizierung von Stählen notwendig sind. Der nächste wichtige Schritt für die Klassifizierung niedriglegierter Stähle ist eine weitere Unterteilung des Bainits. Diese Klasse stellt mit der Vielzahl an Unterklassen (Kapitel 2.1.3) eine große Herausforderung an die Auswahl und Vorklassifizierung der Proben und deren Kontrastierung dar. Aus diesem Grund wird basierend auf den vorgestellten Ergebnissen eine weitere Promotion im Anschluss an die vorliegende Arbeit durchgeführt, die sich mit der Charakterisierung, Quantifizierung und Klassifizierung des Bainits mittels SVM beschäftigt.

5 Enthaltene Publikationen

Im folgenden Kapitel wird der Inhalt der drei referierten Publikationen der vorliegenden Arbeit zunächst stichpunktartig vorgestellt. Im Anschluss werden die Original-Publikationen, die in den internationalen peer-review Zeitschriften „Computational Materials Science“ und „Materials Characterization“ bereits veröffentlicht sind, präsentiert.

5.1 Überblick über die Kerninhalte

Publikation	Inhalt
I	<ul style="list-style-type: none"> • Methodik zur Gewinnung der morphologischen Merkmale • Aufbau des Data Mining Prozesses mit der SVM als Klassifikator • Untersuchung und Diskussion der Datenaufteilung und Datenvorverarbeitung • Klassifizierungsergebnisse morphologische Parameter • Klassifizierungsergebnisse morphologische Substrukturparameter
II	<ul style="list-style-type: none"> • Vorstellung der entwickelten Methode für die Amplitudenparameter • Vergleich von Amplitudenparameter und Haralick-Mittelwert-Parameter für Modellbilder und Zweitphaseobjekte • Systematische Untersuchung der Amplitudenparameter bezüglich der Bildauflösung und Kontrasteinstellungen
III	<ul style="list-style-type: none"> • Klassifizierungsergebnisse der Amplitudenparameter • Korrelationsanalyse der morphologischen und pixelbasierten Merkmalsgruppen • Klassifizierungsergebnisse für die Kombination aus allen Merkmalsgruppen • Signifikanzanalyse der Merkmale • Korrelation mit der Erscheinungsform auf den Mikroskopaufnahmen

5.2 Publikation I

Advanced microstructure classification by data mining methods

Jessica Gola¹, Dominik Britz¹, Thorsten Staudt², Marc Winter², Andreas Simon Schneider², Marc Ludovici³, Frank Mücklich¹

¹Chair of Functional Materials, Saarland University, Material Engineering Center Saarland, Campus D.3.3, 66123 Saarbrücken, Germany

²AG der Dillinger Hüttenwerke, Werkstrasse 1, 66763 Dillingen, Germany

³HTW Saar, Goebenstrasse 40, 66117 Saarbrücken, Germany

Publiziert in: “**Computational Materials Science**“, Volume 148, June 2018, Pages 324-335

Verwendet in der Arbeit mit der Erlaubnis von Elsevier.

Online zugänglich unter: <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2018.03.004>

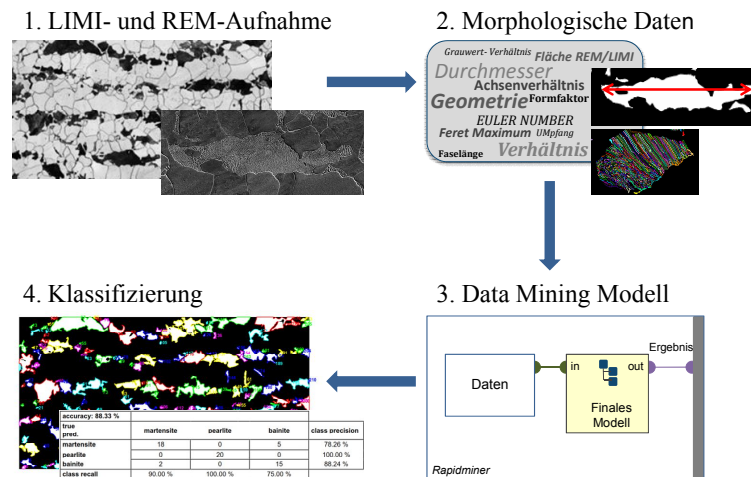


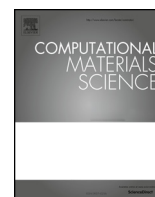
Abbildung 5.1: Graphical Abstract Publikation I.

Zu zitieren als:

J. Gola, D. Britz, T. Staudt, M. Winter, A.S. Schneider, M. Ludovici and F. Mücklich, “Advanced microstructure classification by data mining methods”, *Comput. Mater. Sci.*, vol. 148, pp. 324–335, 2018. (<https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2018.03.004>)

Autorenerklärung nach Brand et al.: [188]

Jessica Gola: Conceptualization, Methodology, Software, Validation, Formal Analysis, Investigation, Data Curation, Writing – Original Draft, Visualization; **Dominik Britz:** Conceptualization, Methodology, Writing – Review & Editing, Supervision, Project Administration; **Thorsten Staudt:** Resources, Writing – Review & Editing, Supervision; **Marc Winter:** Resources, Writing – Review & Editing, Supervision; **Andreas Simon Schneider:** Resources, Writing – Review & Editing, Supervision; **Marc Ludovici:** Software, Validation, Formal Analysis; **Frank Mücklich:** Conceptualization, Resources, Supervision, Funding Acquisition



Advanced microstructure classification by data mining methods

Jessica Gola^{a,*}, Dominik Britz^a, Thorsten Staudt^b, Marc Winter^b, Andreas Simon Schneider^b, Marc Ludovici^c, Frank Mücklich^a

^a Functional Materials, Saarland University, Material Engineering Center Saarland, Campus D 3.3, 66123 Saarbruecken, Germany

^b AG der Dillinger Hüttenwerke, Werkstrasse 1, 66763 Dillingen, Germany

^c HTW Saar, Goebenstrasse 40, 66117 Saarbruecken, Germany



ARTICLE INFO

Keywords:

Microstructure classification
Data mining
Morphological parameter
Steel

ABSTRACT

The mechanical properties of modern multi-phase materials significantly depend on the distribution, the shape and the size of the microstructural constituents. Thus, quantification and classification of the microstructure are decisive in identifying the underlying structure-property relationship of a specific material. Due to the complexity of the microstructure in modern materials, a reliable classification of microstructural constituents remains one of the biggest challenges in metallography.

The present study demonstrates how data mining methods can be used to determine varying steel structures of two-phase steels by evaluating their morphological parameters.

A data mining process was developed by using a support vector machine as classifier to build a model that is able to distinguish between different microstructures of the two-phase steels. The impact of preprocessing and feature selection methods on the classification result was tested.

1. Introduction

The microstructure of advanced steels is usually controlled by sophisticated thermo-mechanical processing or heat treatments post hot rolling [1]. Depending on chemical composition and process control, the microstructure of such steels may consist of a range of different phases. If the microstructure consists of more than one phase, the properties of the material strongly depend on the type and distribution of the respective phases [2]. Therefore, it is crucial to determine the type and amount of the different phases in order to assess the underlying structure-property relationship. Traditionally, microstructures of steels are characterized by using standard metallographic procedures based on chemical etching and light optical microscopy (LOM) and they are classified by comparing the microscopy images with reference series.

Especially for steel and its complex microstructures the comparison with reference series is strongly dependent on the expert's subjective opinion. Nonetheless, steel is still one of the most widely used materials because of its excellent mechanical properties and the huge variety of applications [3]. Therefore, there is significant interest in the development of objective quantification techniques for steels.

In order to characterize steel, the microstructures can be etched for example with a structure etching such as Nital [4] or color etching

techniques like Beraha's etchant [5]. Due to different contrasts obtained by etching the ferritic matrix can be distinguished from a pearlitic, bainitic or martensitic second phase. However, these etchings are limited to empirical approaches and quickly reach their limits, especially for the discrimination of different phase constituents in steels that exhibit more than two phases. Furthermore, the microstructures of complex multi-phase steels are usually too fine to be resolved by light optical microscopy. A proper characterization requires modern metallographic techniques such as high resolution scanning electron microscopy (SEM) or electron back-scatter diffraction (EBSD) [6,7]. Therefore, any approach aiming at identifying the phase constituents of multi-phase steels has to rely on morphological or crystallographic parameters accessible by these techniques [8–13].

Recently, several studies have focused on EBSD for the microstructural characterization of steels, as this technique can provide direct information on the phase composition [6,7,8,14]. For example, in Ref. [14] a multitude of steel grades from different manufactures has been studied and an EBSD-based classification model was proposed. It was shown that the kernel average misorientation (KAM) deduced from EBSD measurements can be used to distinguish between ferrite, bainitic ferrite and martensite. Although those EBSD-based approaches have proven to work out for some steels, the phase separation by means of EBSD is very subjective as it strongly depends on a proper selection of

* Corresponding author.

E-mail addresses: jessica.gola@uni-saarland.de (J. Gola), d.britz@mx.uni-saarland.de (D. Britz), Thorsten.Staudt@dillinger.biz (T. Staudt), Marc.Winter@dillinger.biz (M. Winter), Andreas.Schneider@dillinger.biz (A.S. Schneider), marc.ludovici@uni-saarland.de (M. Ludovici), muecke@matsci.uni-sb.de (F. Mücklich).

<https://doi.org/10.1016/j.commsci.2018.03.004>

Received 22 November 2017; Received in revised form 28 February 2018; Accepted 1 March 2018

Available online 23 March 2018

0927-0256/ © 2018 Elsevier B.V. All rights reserved.

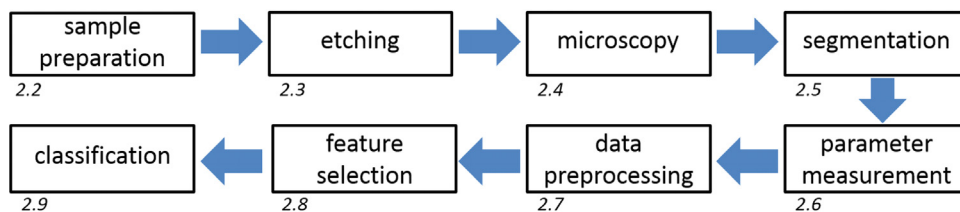


Fig. 1. Steps of the different methods used to get the data for the data mining classification.

the preparation, measurement and evaluation parameters [14].

A completely new approach for the classification of microstructures using data mining methods was presented by Velichko et al. [15]. Data mining is the process of knowledge discovery in datasets [16]. It summarizes all analysis procedures required in order to identify interesting trends and patterns within data and includes data preparation and data modeling. Various models can be constructed, depending on the research goal. In order to properly interpret the models, standard evaluation and statistical procedures are needed [16]. In their study, Velichko and coworkers have used data mining methods to classify the different graphite morphologies in cast iron by using a support vector machine (SVM) as a classifier. A SVM is a binary classification method that takes labeled data from different classes as input and outputs a model for classifying new unlabeled/labeled data into different classes. Basically, Velichko et al. have deduced morphological parameters from optical micrographs of several reference samples and analyzed the large quantity of data with a data mining tool. This enabled them to find trends, clusters or anomalies as well as relations between the morphological parameters in the data which were characteristic for the graphite morphologies and could be used to derive a classification model. This model was tested on independent samples and showed a classification accuracy of about 95% for most of the different graphite morphologies. Unlike classic metallographic procedures, the data mining approach has the advantage of not having a scope for a subjective interpretation of the microstructure. A similar data mining-based approach was used by Liu et al. for the classification of complex steel structures [17]. In their study, workflows were developed using a nearest neighbors (kNN) classifier and pixel-based parameters to classify steels using light microscopy images of single-phase pearlitic samples and samples with a mixed microstructure. For steel with two classes they found good agreement in terms of the phase fraction in comparison to manual classification results. For pearlite the classification workflow could not be used, so in a first approach artificially created structures were tested, which reached 93.8% accuracy. DeCost and Holm showed that a classification of 7 different materials (ductile cast iron, gray cast iron, malleable cast iron, annealing twins, brass hypereutectoid steel and superalloy) with visual features can be performed by using one SVM model for each image class. Their classifier system reached a cross-validation accuracy of 83% [18].

Besides data mining, deep learning methods can be applied for the classification of microstructures. For example, Chowdhury et al. showed in a case study that pre-trained neuronal networks could be used for feature extraction from images of alloys of varying Sn–Ag–Cu compositions showing dendritic structures. With these features they reached maximum classification accuracies of 97% by using linear SVM as a classifier in order to distinguish between microstructural images in terms of the presence of dendrites [19]. Although deep learning methods have recently received considerable interest and might be used for microstructure classification [20,21], with convolutional neural networks (CNNs) the features of the classification can no longer be accessed and thus the material-based background is no longer given.

The aim of this work is to prove that a data mining process in combination with traditional microstructural parameters can be used as a means to objectively classify the microstructure of two-phase steels with a ferritic matrix using the SVM as a classifier. The structure of the data mining process is described and different preprocessing and data

split options are discussed. In contrast to the graphite morphologies in cast iron, typical microstructures of steels are more complex because of the substructure. Therefore, the classification is based on morphological parameters extracted from light optical microscopy and electron microscopy images. In order to reach a high degree of generalization a large amount of data is used to train the model. In a first step, a database is generated that contains a considerable variety of structures and objects representing the different classes of microstructures, which are then used to train the model.

2. Experimental

The principal approach of the data mining-based classification developed in this study is illustrated in Fig. 1. The different steps of sample preparation, etching and microscopy have to be performed to get an image of the microstructure. Next the image has to be converted to a binary image and the parameters to build the data mining model have to be measured. The data were preprocessed and the number of parameters was reduced by feature selection methods. With the final model microstructures can be classified by their parameters.

2.1. Material

In order to obtain a representative amount of data for the training and testing of the classification model a large number of samples with well-defined microstructures is required. For this purpose, samples from thermo-mechanically rolled steel plates with a carbon content of approximately 0.06 wt-% and two-phase microstructures consisting of a ferritic matrix and either a pearlitic, martensitic or bainitic second phase were used. In total, 2586 phase grains – hereafter called objects – with a martensitic, 564 with a pearlitic and 1326 objects with a bainitic second phase were investigated on the basis of different samples.

2.2. Sample preparation

For the microstructural characterization, cross-sectional samples were taken from the as-received material with the plane of view parallel to the rolling direction. The specimen were ground with 400–2500 grit SiC abrasive paper and then polished successively using 9, 6 and 3 μm diamond suspension. Subsequently, a 120 s OP-S polish was used to obtain the final surface finish.

2.3. Etching

The samples were etched with a modified Beraha etching solution consisting of 3 g of potassium metabisulphite and 100 ml of water to contrast the second phase in the ferrite matrix. The etching was applied for an etching time of 35–50 s depending on the type of the second phase. The relatively short exposure time in combination with the Beraha etching had the advantage that no structural etching appeared on the matrix while the second phase objects were nicely visualized and appeared dark in the light microscope [22]. Furthermore, the substructure of the second phase was also accessible at higher magnifications in the SEM, which was crucial in order to distinguish the different types of second phase.

2.4. Microscopy

To extract the morphological parameters describing the second phase objects a DM6000M light microscope from Leica and a laserscanning microscope LEXT OSL4100 from Olympus were used. In order to achieve highly detailed images of the microstructure and gather a statistically significant number of objects, images were taken at predefined positions of the samples over an area of $300\ \mu\text{m} \times 350\ \mu\text{m}$ at a magnification of $1000\times$ and stitched together. These areas on the samples were marked with Vickers indents and additionally imaged by a Zeiss Merlin scanning electron microscope to resolve the substructure of the second phase. To cover the same area as in the light microscope, 24 images were taken with a magnification of $1000\times$ and a store resolution of 4096×3072 pixel. As for the light microscope images, these images were stitched together using Microsoft Image Composite Editor (ICE). For the imaging, an Everhart-Thornley detector was used and the SEM was operated at an acceleration voltage of 5 kV, a probe current of 300 pA and a working distance of 5 mm.

2.5. Segmentation

Microscope images had to be converted to binary images using the image analysis program AxioVision from Zeiss in order for the computer to be able to process the data. The second phase objects were separated from the matrix by threshold value segmentation, which was carried out on the light microscopic images after standard filters such as shading correction and denoising had been applied. Several filters like dilatation were applied on the resulting binary images in order to delete artifacts and errors. Afterwards, the binarized light microscope images were overlaid with the corresponding SEM images using Adobe Photoshop CS6 and the area containing the second phase objects was cropped. The cropped SEM images were added to AxioVision and another threshold value segmentation on the combined images was applied to binarize and capture the substructure of the second phase [23].

2.6. Parameter measurement

In a next step, a broad variety of morphological parameters describing the structure and the substructure of the second phase objects were measured on the binary images [13] using AxioVision and A4i from Aquinto AG Version 5.10 a., where most of the parameters were already implemented. These traditional microstructural parameters are used in different fields like material science, but also biology or medicine for a quantitative analysis of microscopy images. In the case of material microstructure characterization, they are very helpful in quantitatively evaluating microstructures and their morphology [12]. Only two additional parameters had to be defined and calculated separately. The first one represented the area density of the substructure in a second phase object and the second one was the normalized gray value ratio of each second phase object. The substructure density was a measure of how much of the inner structure is contained in a single object and includes information on the substructure. The microscopic images itself also showed differences in the appearance of the second phase due to their appearance after etching. For the gray value ratio, the images were transformed into 8 bit grayscale images and the minimum, maximum and average grayscale of each object were determined and the new parameter was calculated. This parameter is thus associated with the texture of the phase in the light microscopic image. In total, 27 parameters were obtained for each object and are summarized in Table 1. These parameters, which were measured for the individual objects on each sample, were saved in an excel sheet and taken as input for the data mining model [13,15,24].

2.7. Data preprocessing

Data preprocessing influences the outcome of machine learning algorithms, especially if the feature values do not confirm to a common range or variance [27]. To address this issue, the values were normalized by a standardization method. This method transforms each of the feature vectors so as to get a zero mean (μ) and unit standard deviation (σ). Since for some of the parameters, feature visualization showed a standard distribution while for others it showed a skewed distribution, the differences in the data preprocessing before normalization were investigated by comparing the original data set of 27 parameters (dataset 1) with a data set transformed from the skewed distribution to the logarithm standard distribution (dataset 2).

2.8. Feature selection

Meaningful parameters for the model were selected by feature selection techniques. Feature selection is a technique to reduce dimensionality by finding a subset of the original features set that represents the dataset in the best way [28,29]. A dimensional reduction helps to reduce irrelevant information which may otherwise distort the model. Thus, the characteristic parameters that enable a distinction between the classes have to be identified in order to reduce the dimensionality and to guarantee a generalization of the results. One of the most common strategies for feature selection is a filter-based method which is used for preprocessing and ranking feature importance, regardless of the model selection.

As several morphological parameters deduced from the binarized microscope images correlated with each other such as the diameter and the perimeter of an object, which reduces the accuracy of the classification, a filter was applied such that only independent parameters remained. First, the number of parameters was reduced in order to find correlated parameters. For that reason, a parameter correlation matrix was built and all parameters with a correlation factor higher than 0.95 were removed. The remaining parameters were analyzed by different weight and feature ranking methods that were implemented in the data mining program Rapid Miner by Rapid-I GmbH [27,30]. The results of the different methods were combined to determine the importance of the parameters. After that a successive backward elimination starting with 15 parameters was performed to find the number of parameters with the highest performance. This data was used to compare the performance of the models with 27 parameters to a model of lower dimension.

2.9. Machine learning methods

In order to analyze the data extracted from the micrographs a data mining model was developed. The model was trained with the morphological parameters from the reference samples in order to identify characteristic microstructural patterns and objectively classify the microstructure. The microstructures of the second phase of the tested samples were categorized into three classes: pearlite, martensite and bainite. A SVM was implemented in the process of Rapid Miner by Rapid-I GmbH [27,30]. The SVM was chosen because this classifier can be used for a multiclass classification. The Radial Basis Function Kernel (RBF) was used because of the big amount of data and their nonlinear dependency [31]. The parameters C and γ define the model and they affect the quality of the classification by the SVM and describe the shape of the separating hyper plane. These parameters were analyzed to improve the generalization of the SVM model. C is a parameter that allows trading off training errors and model complexity [32].

Table 1
Traditional morphological parameters measured by two programs used in the data mining model [25,26].

Name	Description
Diameter	Diameter of a circle with an equal area.
Diameter filled	Same as diameter, but adjusts the area of an equivalent circle to account for filled holes in an object.
Ellipse major	Length of the major axis of the ellipse with the same geometric moment of inertia as the region. The moment of inertia is related to the region centre of gravity.
Ellipse minor	Length of the minor axis of the ellipse with the same geometric moment of inertia as the region. The moment of inertia is related to the region centre of gravity.
Fiber length	Length of a fiber-like region. In order to calculate the fiber length, a structure that is actually similar to a fiber is required.
Feret maximum	Two straight lines are positioned on opposite sides of the object, like a sliding caliper, at 32 angle positions. The corresponding distance is measured for each angle position. The maximum value determined is the feret maximum.
Feret minimum	The feret minimum parameter is measured in the same way as the feret maximum. The minimum value determined is the feret minimum.
Feret ratio/stretching D	The ratio of feret minimum to feret maximum.
Area	Area of a region excluding any holes it may contain.
Area filled	Area of a region including any holes it contains.
Area convex	Area of convex hull of a region. The current region is surrounded by a convex polyline. The filled area of the resulting region is then measured.
Stretching F	The ratio of area filled to the area of a circle with a diameter of feret maximum.
Axial ratio	The ratio of ellipse minor to ellipse major.
Mittferet	Mean of the feret diameter.
Euler number	Describes the topology of an object. It is calculated by the tangents of the object. An object without any holes is given the value 1.
Shape factor	Describes the form of a region on the basis of its circularity. A perfect circle is given the value 1.
Diameter max. Inscribed circle	The measurement of a circle, the diameter of which is expanded to its maximum, within the boundaries of the object.
Radius	Radius of a circle with an equal area.
Perimeter	Perimeter of a region including the perimeter of holes it contains.
Perimeter filled	Perimeter of a region excluding any holes it contains. The perimeter of the filled area is then measured.
Perimeter convex	Perimeter of convex hull of a region. The current region is surrounded by a convex polyline. The perimeter of the filled area of the resulting region is then measured.
Gray value ratio	The ratio of the difference between the maximum gray value and the average gray value to the difference between the mean gray value and the minimum gray value multiplied by the ratio of the difference between maximum and minimum divided by 255.
Area convex/area filled	The ratio of area convex to area filled.
Perimeter convex/perimeter filled	The ratio of perimeter convex to perimeter filled.
Area to total area	The ratio of area filled of an object to the sum of area filled of all objects in the image.
Area density of substructure	The ratio between the total area of the substructure particles deduced from the SEM images and the area of the corresponding object as determined in the optical micrographs.

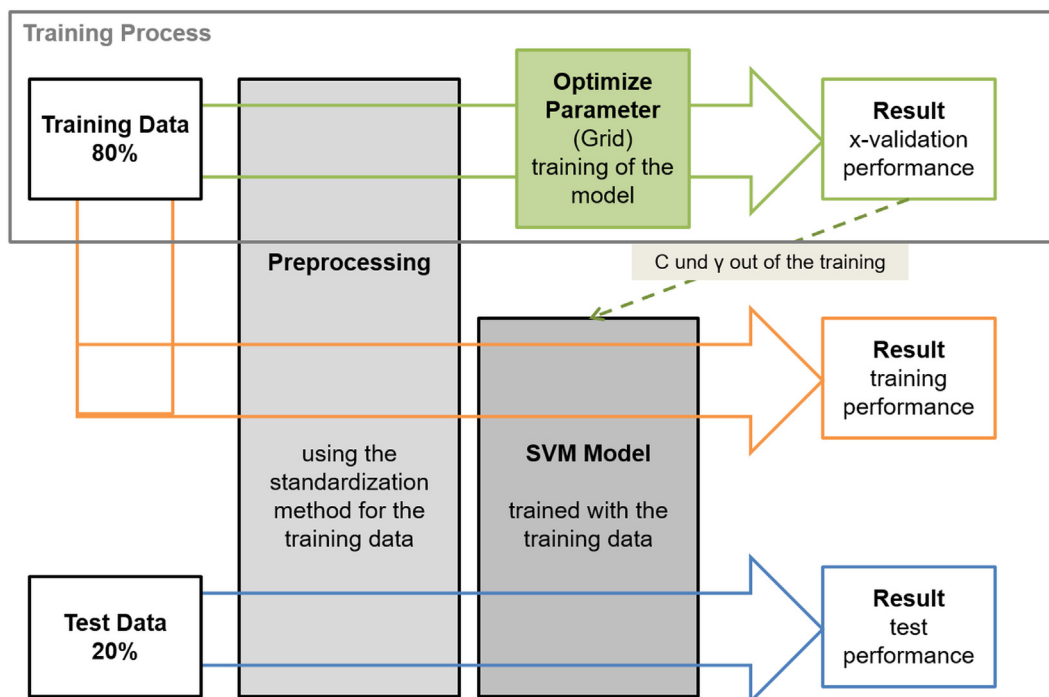


Fig. 2. Overall process chain in Rapid Miner with the three different performances for testing a model to classify microstructures. The training process used 80% of the whole data set to find the parameters C and γ in a grid search; with these parameters the final model is built. The final model is tested using the training data to get the training performance. The other part of the data (20%) was used to test the model with independent data and to get the test performance. The layers for training and testing are connected and fully automated.

2.9.1. Classification process

For the development of the classification process, the data was divided into a training and a test dataset by using two different data splitting methods. The data was shuffled and divided into training and test data in a ratio of 80:20 and compared using the sample-wise data split. Using the sample-wise data split, the data was divided into a test and a training set, i.e. some of the samples were only used for training and other samples only for testing. In that case, test and training data were completely independent because of the different samples. Using the shuffled data split, the whole variety of structure appearances in one class of different samples can be maintained and leads to a higher generalization of the model compared to a sample-wise data split. In case of the sample-wise data split there was less variety because only half of the samples were used to build the model. The test data was only used in the end to test the final model. By using the training data the best parameters for the SVM could be determined and the final model was built. The process implemented for the training of the model using the SVM as a classifier has two sub-level processes inside the *Optimize Parameter* operator [24]. Subsequently, the training data had to be imported from the Excel sheet into Rapid Miner and an operator was used to normalize the data using the standardization method [16]. In the next step, the best combination of the parameters C and γ from the SVM had to be found in a grid search using the *Optimize Parameter* operator. With this operator, numerous predefined combinations of C and γ were tested in a loop of its subprocesses. In these subprocesses, a cross-validation (x-validation) split the data into 5 parts. From these 5 parts, 4 were used for training and one for validation. On the basis of all 4 training data sets, the SVM successively created a model and predicted the validation performance for a given set of C and γ combinations. The result of the *Optimize Parameter* operator was the x-validation performance. This performance is the arithmetic mean of the accuracy of the 5 validation data sets with the best combination of C and γ out of the grid search.

On the basis of the best combination of C and γ , the SVM built the final classification model using all training data. In a next step, the model was tested with the whole data of the training set (80% of the whole data set) to get the training performance. The training performance shows how accurately the model is able to predict the data used to train the model. To get the test performance of the test data (20% of the whole data set), the test data set was normalized using the standardization model of the training data and subsequently the final model was tested.

The overall process with the three different types of results and the related performances is shown in Fig. 2. The different layers for grid search, training and testing are connected and fully automated.

The performance value of the trainings and test result shows how well the models were able to perform on the training data and the new test data. In a previous work, we investigated data mining models that were only trained by an x-validation and found that the x-validation performance is not meaningful enough to check the performance of the trained model. For this reason, it is necessary to test independent data on the final model to check the performance [31]. If the three performances in our data mining process (Fig. 2) are close together, our model has a high generalization and is able to predict new data as good as the training data.

2.9.2. Common performance metrics

The three different classification results of the developed process were summarized in confusion matrixes [33]. The major diagonal of the matrix shows the correctly classified data and the outside shows the incorrectly classified data. The overall accuracy in the confusion matrix was calculated by dividing the sum of the entries from the major diagonal by the total number of samples with the best combination of C and γ [34]. Fig. 3 shows a confusion matrix for a two-class problem.

As the overall accuracy does not indicate how the accuracy is distributed in the individual classes, the parameters, the true positive rate

		True class	
		p	n
Predicted class	Y	True Positive (TP)	False Positive (FP)
	N	False Negative (FN)	True Negative (TN)

Fig. 3. Confusion matrix for a two-class problem.

(TP), the false positive rate (FP), the true negative rate (TN) and the false negative rate (FN) defined in Fig. 3 were calculated from the confusion matrix. The true positive rate (TP) is the rate of objects correctly classified as positive. The false positive rate (FP) refers to negative objects incorrectly classified as positive. The true negative rate (TN) corresponds to negative objects that are correctly classified as negative and the false negative rate (FN) represents the negative objects that are incorrectly classified [35,36]. The common performance metrics calculated from the confusion matrix like accuracy, precision, recall and kappa are explained in [37].

3. Results

This section reports the results from the data mining process after different data preprocessing methods and two different data split techniques have been applied. Preprocessing, feature selection and data split are compared in Section 3.1. and the different parameters are compared in Section 3.2. The success of the different methods is compared based on the test performance and the kappa value of the test data for the developed data mining models.

3.1. Classification using morphological parameters

Fig. 4 shows representative laser microscopy images from tested samples with either a pearlitic, martensitic or bainitic second phase in a ferritic matrix as well as the corresponding binary images obtained by threshold value segmentation. SEM micrographs in Fig. 4c, f and i shows examples of typical second phase objects for each of the three different types of samples. In the overview images, it can be seen that size and distribution of the second phase objects vary strongly among the different types of test samples. The samples with the pearlitic second phase, as shown in Fig. 4a–c, exhibit objects with diameters up to 100 μm , which are partially connected and aligned in the rolling direction. On the contrary, the second phase objects in the samples with the bainitic second phase are much smaller and homogeneously distributed in the microstructure. The second phase objects in the martensitic dual-phase structure also exhibit diameters in the range of 100 μm and are strongly elongated in the rolling direction.

The morphological parameters (as defined in Table 1) of each object were measured and taken as input for the data mining process. In total, the data contains 4476 objects, from which 2586 objects were allocated to the martensite class, 564 to the pearlite class and 1326 to the bainitic class.

3.1.1. Classification results of the shuffled data split

The data was shuffled and divided into training and test data in a ratio of 80:20. For the shuffled data, the martensite class contained 517

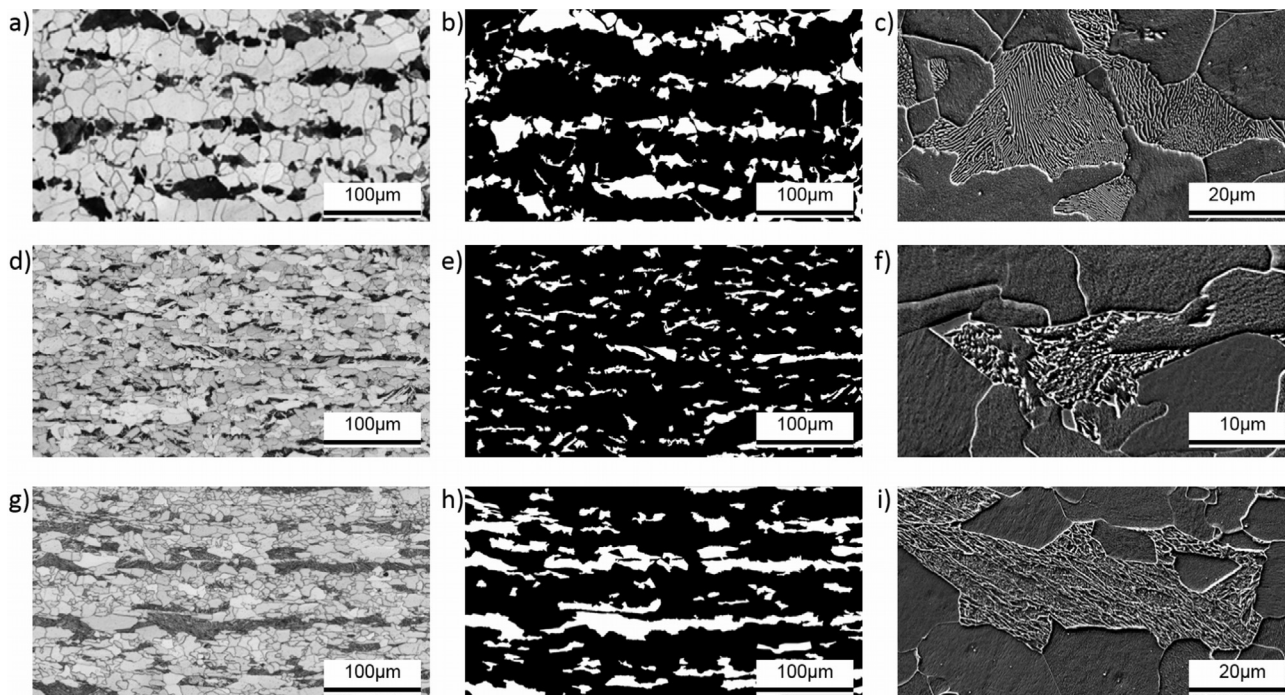


Fig. 4. Representative laser microscopy images of a pearlitic (a), a bainitic (d) and a martensitic (g) sample as well as corresponding binary images (b, e, and h); the scanning electron microscopy images show examples of the different substructures for (c) pearlite, (f) bainite, and (i) martensite.

Table 2
Summary of the different datasets that were used to train and test the data mining model.

Name	Dataset 1	Dataset 2	Dataset 3	Dataset 4
Number of parameters	27	27	10	10
Preprocessing	Raw	Log transformed	Raw	Log transformed

objects, whereas 112 objects were considered for the pearlite class and 265 for the bainite class, respectively. From this data, different datasets were used for the experiments, as summarized in Table 2.

As shown in Table 3, dataset 1 yielded an x-validation performance of $85.03\% \pm 1.24\%$ and a training performance of 89.78% . The total accuracy of the test data was 84.80% . The values of test and training performance were close to each other implying that the model can perform a reproducible classification on unknown test data as well as on training data.

For dataset 2, which was transformed to log standard distribution before standardization, the x-validation performance was $87.60\% \pm 0.87\%$. The training performance was 91.57% . The total test data accuracy was close to the training data accuracy with 86.82% .

The higher performance values of dataset 2 demonstrated that the log transformation of the input data improves the result of the classification and the quality of the model. In both cases the performance measurement kappa showed a good result with values larger than 0.7 (Table 3). The value for dataset 2, which was larger than for dataset 1, also indicated that the model was more efficient in handling data with a

Table 3
Classification results for the three performance measurements of x-validation, test and training and the kappa values for dataset 1 and dataset 2 for the shuffled data.

Dataset	Number of parameters/preprocessing/data split	Kappa x-validation	Accuracy x-validation [%]	Accuracy training data [%]	Accuracy test data [%]	Kappa test data
Dataset 1	27/raw/shuffled	0.725 ± 0.026	85.03 ± 1.24	89.78	84.80	0.719
Dataset 2	27/log transformed/shuffled	0.774 ± 0.016	87.60 ± 0.87	91.57	86.82	0.758

Table 4
Morphological parameters after removing correlated parameters and parameter ranking.

Parameter	Weight	
Gray value ratio	<div style="display: flex; align-items: center; justify-content: center;"> <div style="border-left: 1px solid black; width: 10px; height: 100%;"></div> <div style="text-align: center; margin: 0 5px;">1</div> <div style="border-right: 1px solid black; width: 10px; height: 100%;"></div> </div>	
Area density of substructure		
Diameter		
Ellipse major		
Euler number		
Diameter max. Inscribed circle area		
Area to total area		
Ellipse minor		
Fiber length		
Feret ratio		
Stretching F		
Shape factor		
Area convex/area filled		
Perimeter convex/perimeter filled		0

normal distribution than log distributed parameters. The test performance of the log transformed data of 86.8% represented a 2.38% increase compared to the raw data by using the same amount of data and number of parameters.

In the next steps, the parameters listed in Table 1 were reduced to further improve the classification model. After removing the correlated parameters, 15 independent parameters remained. These parameters

Table 5

Classification results for the three performance measurements of x-validation, test and training and kappa values for dataset 3 and dataset 4 for the shuffled data.

Dataset	Number of parameters/preprocessing/ data split	Kappa x-validation	Accuracy x-validation [%]	Accuracy training data [%]	Accuracy test data [%]	Kappa test data
Dataset 3	10/raw/shuffled	0.750 ± 0.005	86.29 ± 0.29	90.81	84.58	0.716
Dataset 4	10/log transformed/shuffled	0.774 ± 0.016	87.60 ± 0.87	90.89	87.15	0.764

were weighted using different methods to determine the importance of the parameters. The results of the weighting process are shown in Table 4.

According to the weighting processes, the gray value ratio was the most relevant parameter with a value of 1, followed by the area density of the substructure and the diameter. The ratio of area convex to area filled and the ratio of perimeter convex to perimeter filled with values close to 0 were less relevant. These 15 parameters were further reduced by a successive backwards elimination according to their weight in Table 4. The best performance was reached using 10 parameters.

For dataset 3, the x-validation performance was 86.29% ± 0.29%. The accuracy was 90.81% for training and 84.58% for testing. The classification results for dataset 4 showed higher performance values. As shown in Table 5 the x-validation performance was 87.60% ± 0.87%, the training performance was 90.89% and the test performance was 87.15%.

The results of dataset 4 showed that the performance of the x-validation, training data and test data was higher than that of dataset 3. The performance measurement kappa showed a higher value for dataset 4, which also indicates that the model is more efficient in handling the log transformed parameters than the raw data (Table 5). In both cases the kappa value for the test data was greater than 0.7 and in the same order as in dataset 1 and dataset 2 using 27 parameters. It can be seen that the test performance of dataset 4 was increased by 3% compared to dataset 3. Performance comparisons of classification models using 27 parameters and 10 parameters showed that the test performance was equal in the case of raw data (84.8% with dataset 1 and 84.58% with dataset 4) and increased from 86.82% (dataset 2) to 87.58% (dataset 4) for log transformed data. The best classification result in testing with 87.15% accuracy was reached with dataset 4, as shown in Table 6.

The accuracy rate for the martensite class was 94.20% with a precision of 85.74%, whereas values of 77.80% and 89.90% were found for the pearlite class and of 77.30% and 89.52% for the bainite class.

3.1.2. Classification results of the sample-wise data split

Moreover, a sample-wise data split was used for dataset 1 and dataset 2 to compare the result with the shuffled data split. The data was divided into a test and a training set, i.e. some of the samples were only used for training and other samples only for testing. In that case, the test and the training data sets were completely independent because of the different samples. In order to train the model, half of the samples of each class were used. In total, the training data contained 2511 objects, from which 1203 objects were allocated to the martensite class, 289 to the pearlite class and 1019 to the bainitic class. The remaining data was used for testing the model. The test set contained 1894 objects in total,

Table 6

Confusion matrix for the classification of the morphological parameters (dataset 4) of the second phase objects for the three classes (martensite, pearlite and bainite) in Rapid Miner.

Accuracy: 87.15%				
↓Prediction /true→	Martensite	Pearlite	Bainite	Class precision
Martensite	487	24	57	85.74%
Pearlite	7	88	3	89.90%
Bainite	23	1	205	89.52%
Class recall	94.20%	77.80%	77.30%	

1290 objects of the martensite class, 252 of the pearlite class and 352 of the bainitic class.

As shown in Table 7, dataset 1* yielded an x-validation performance of 82.39% ± 0.67%, a training performance of 85.19% and a total test data accuracy of 72.03%. The values for test and training performance were divergent and the model was not able to classify unknown test data as efficiently as training data. For the dataset 2*, the x-validation performance was 86.85% ± 1.64% and the training performance 93.76%. The total test data accuracy was 56.66% and hence much lower than in the training, which means that for independent data the log transformed data model had produced a less reproducible classification.

The results of dataset 1 in the first experiments using the shuffled data split showed a higher classification result for the test data than the results of dataset 2. But in this case the x-validation and training performance for dataset 2* was higher than for dataset 1*. Test and training performance showed a discrepancy of 37.10%, which means that the model is not able to classify independent data as efficiently as known data. The gap between test and training performance indicated that the model is overfitting. This could also be seen from the kappa value of 0.171 (Table 7).

The different sample splits demonstrated that the performance of the x-validation and training data was lower for the sample-wise data split than for the shuffled data split. But for both techniques the performance values for the training were greater than 80% and in the same order. The test performance of the sample-wise split was 72.03% and hence much lower. In addition, the kappa values for the sample-wise data split both showed a lower value.

To sum up, the best results for the test data with the developed data mining process and morphological parameters was reached by using the shuffled data split and 10 parameters which were log transformed (dataset 4) with a test accuracy of 87.15%. The results of the classification indicated that the morphological parameters of the objects form a satisfactory basis for a classification, but solely were not sufficient to perform a stable classification of the different classes. The most important morphological parameters for classification were the gray value ratio and the substructure density. Both parameters already contain information about the substructure. Therefore, in order to improve the classification performance, additional parameters of the substructure were tested in the data mining process.

3.2. Classification using substructure parameters of the second phase

In the next step, substructure parameters of the second phase objects were used for the classification process. The substructure of the second phase objects differed in appearance for the different classes for a certain etching. This offered further possibilities for separating the phases from each other. In order to see the very fine differences of the phases, high resolution images were necessary, as these structures could not be resolved in light microscopy images. Electron microscopy offers the possibility to dissolve these structures and therefore it is used today as one of the standard methods for the characterization of texture and crystallographic properties of microstructures [6–12]. In order to allow for the substructure to be used by data mining models, a methodology was developed to describe the substructure of an object using the same morphological parameters as for the second phase objects. The data for the substructure was created by overlaying the SEM image with the

Table 7

Classification results for the three performance measurements of x-validation, test and training and the kappa values for dataset 1 and dataset 2 for the sample split data.

Dataset	Number of parameters/preprocessing/data split	Kappa x-validation	Accuracy x-validation [%]	Accuracy training data [%]	Accuracy test data [%]	Kappa test data
Dataset 1 ^a	27/raw/sample-wise	0.694 ± 0.011	82.39 ± 0.67	85.19	72.03	0.510
Dataset 2 ^a	27/log transformed/sample-wise	0.774 ± 0.029	86.85 ± 1.64	93.76	56.66	0.171

segmented light microscope image as a mask. This was necessary in order to be able to analyze individual objects separately [23]. In the combined image, the substructure of each second phase object could be binarized and then be measured. Fig. 5 shows the result of the binarization of a pearlitic object, in which individual, non-connected cementite particles were marked in different colors. It is important to note that for pearlite and bainite objects the binarized structure more or less represents the cementite particles, while for martensitic objects the binarized structure is related to lath boundaries and cementite particles. On the basis of the binarized substructure the morphological parameters defined in Table 1 were measured.

The average value and the standard variance of the logarithmic distribution for each of the morphological parameters of all sub-objects of a single object, as described in Table 1 were used as parameters in order to describe the substructure of a whole object. These parameters were used to build the data mining model. Only representative second phase objects were chosen to demonstrate that the second phase parameters can be used to distinguish between the different classes more effectively. Because of the high number of parameters in relation to the number of objects, only significant parameters were chosen to train the data mining model. After removing correlated attributes and weight of the parameters as described in Section 3.1, 5 parameters (area, fiber length, feret maximum, feret minimum as well as shape factor) were determined by a backward selection. The average value and the standard variance of these parameters were used for the classification. It is important to note that these parameters represent only geometrical properties of the imaged structures and contain neither information on physical properties nor on the production process parameters.

Fig. 6a and b shows examples of the binarized substructure of a

pearlite and a martensite object. The pearlite object exhibits its typical, lamellar structure composed of alternating layers of ferrite and cementite in different colors. Martensite shows a fine irregular network structure related to the lath structure as well as small cementite particles. The average values of the logarithmic distribution for the maximum feret diameter and area parameters of all analyzed objects were plotted in Fig. 6c and d. It can be seen that for both parameters the pearlite class shows larger values than the martensite class. The differences in the data suggest that these characteristics enable the distinction is possible with these characteristics.

The 10 most important parameters were used as input for the data mining model and their influence on the classification result was analyzed. The data contained parameters of 123 objects that reveal the characteristic structure of the different phases. The model was trained for three classes. The classes were evenly distributed, hence each class contained 41 objects. The data were shuffled and 50% of the objects were used for training and 50% for testing. The x-validation performance was 97.15% ± 5.71% and a kappa value of 0.957 ± 0.086 was found. The training performance was 100%. The results of the classification model on the basis of the test data of 88.33% were shown in Table 8.

For the martensite class, the accuracy rate was 90% with a precision of 78.26%. In total, only two objects were classified incorrectly and both were assigned to the bainite class. Both accuracy rate and precision rate of the pearlite class were 100%, whereas for the bainite class the corresponding values were 75% and 88.24% respectively.

Overall, the classification performances considering the substructure parameters showed a higher accuracy rate than the one only based on the object parameters. The kappa value of the substructure parameters was 0.825 and hence higher than the kappa values for the

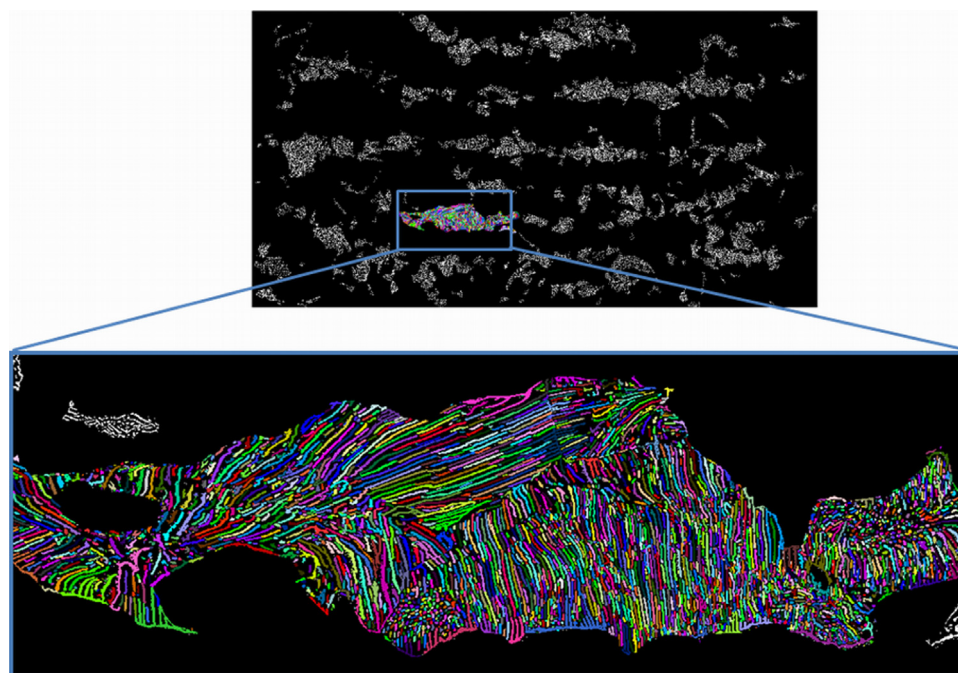


Fig. 5. Combined segmented LOM and SEM image; the individual cementite particles of the pearlite are shown in different colors.

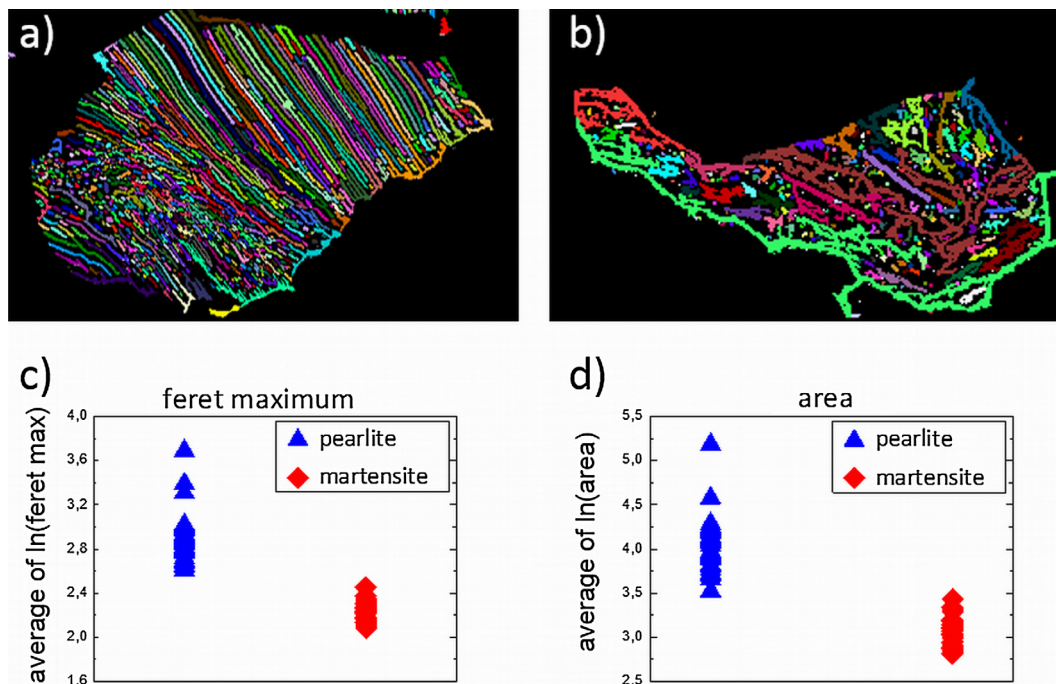


Fig. 6. Segmented and etched substructure of (a) a pearlite object and (b) a martensite object; comparison of the (c) Feret maximum and (d) area parameter for pearlite and martensite.

Table 8
Confusion matrix of the classification of the substructure parameters for the three classes martensite, pearlite and bainite in Rapid Miner.

Accuracy: 88.33%				
True pred.	Martensite	Pearlite	Bainite	Class precision
Martensite	18	0	5	78.26%
Pearlite	0	20	0	100.00%
Bainite	2	0	15	88.24%
Class recall	90.00%	100.00%	75.00%	

morphological parameters of the objects.

In Table 9: Summary of the classification results for different datasets whereby the number of parameters, preprocessing methods and data splits were changed. The SVM parameter C and γ , the total test accuracy and kappa of the classification are shown. Table 9 the different classification experiments described in Sections 3.1 and 3.2 are summarized together with the corresponding parameters C and γ as well as test accuracy and kappa.

As the table above shows, the results of the test data where the data are split sample-wise were much lower than with the shuffled data. In this case the kappa values support these results with values between 0.519 and 0.171 for the sample-wise split compared to values between 0.716 and 0.825 for shuffled data. The best results for the test data using the developed data mining process was reached for dataset 4 and

Table 9
Summary of the classification results for different datasets whereby the number of parameters, preprocessing methods and data splits were changed. The SVM parameter C and γ , the total test accuracy and kappa of the classification are shown.

Morphological parameter	Number of parameters/preprocessing/data split	C	γ	Accuracy test data [%]	Kappa test data
Dataset 1	27/raw/shuffled	220,000	0.0036	84.80	0.719
Dataset 2	27/log transformed/shuffled	260,000	0.0019	86.82	0.758
Dataset 3	10/raw/shuffled	184,000	0.0272	84.58	0.716
Dataset 4	10/log transformed/shuffled	155,000	0.0059	87.15	0.764
Dataset 1*	27/raw/sample-wise	260,000	0.0010	72.03	0.510
Dataset 2*	27/log transformed/sample-wise	300,000	0.0050	56.66	0.171
Substructure	10/log transformed/shuffled	272,750	0.00048	88.33	0.825

the substructure parameters. The γ -values, which define the impact of a single training example, with low values meaning ‘far’ and high values meaning ‘close’, were low in all cases and showed values between 0.0272 and 0.00048. The lowest value was reached for the substructure. The C parameter, which is a parameter that allows one to trade off training errors and model complexity, showed lower values for datasets 3 and 4 than for datasets 1 and 2.

4. Discussion

The results of our data mining models demonstrate that the developed data mining process is able to build models that can classify different phases within steel samples. Based on the developed process chain it is possible to train and test the data gained from a quantitative analysis of the microstructure and its substructure in order to automatically build the final model.

The results of the classification on the basis of the given data with different datasets show that data preprocessing improves the results. The kappa values of the shuffled dataset indicate a good classification performance. The test accuracy of the classification can be improved by 2.4% for 27 parameters and by 3% for 10 parameters using the log transformed dataset instead of raw data. Furthermore, filter methods show a way to get a high performance while simultaneously reducing the complexity of the model. Decreasing the number of parameters from 27 to 10 leads to less complex models with smaller C values and provides for an equal performance both in training and testing with raw

data and a higher performance with log transformed data.

From these results it can be deduced that the most important 10 parameters contain meaningful information for the separation of the predefined phases. Table 4 shows that, according to the feature selection, the gray value ratio and the substructure density are the most important parameters followed by other morphological parameters. In contrast to the remaining morphological parameters both parameters describe the internal structure of the second phase objects. Furthermore, the size of the second phase objects, described for example by diameter and area, as well as their aspect ratio, which is described by the ellipse minor and major parameters, seems to play an important role in distinguishing between the different phases. The binary images of the bainitic two-phase microstructure used as samples show small second-phase sub-objects with a rather homogeneous aspect ratio compared to martensitic or pearlitic microstructures, as shown in Fig. 4. The second-phase objects in the martensitic and pearlitic dual-phase structure exhibit diameters in the range of 100 μm and are strongly elongated in the rolling direction. Therefore the aspect ratio of these objects is higher than for bainitic objects.

However, the gray value ratio is the most important parameter. It describes the structure of the phase occurring in the light microscope on the basis of its gray values and thus contains information on the substructure of the objects. Of course, the appearance of the phases in light microscopy images depends on the type of etching and the environmental conditions, and it is partially susceptible to errors. However, under constant environmental conditions, the etching results can be compared and differences in texture and color, in case of color etching, can be identified between the classes on the images. In this work, only the gray value-based texture of the objects is evaluated as a parameter, not the color. Pearlitic structures, for example, show large gray value ranges between minimum and maximum gray value in the light microscope due to the contrast of the typical lamella structure. In bainitic and martensitic microstructures, however, the microscope images show a smaller gray value range with a homogeneous distribution of the gray values. The structures of bainitic and martensitic objects are often much finer than the pearlite lamellas and therefore cannot be completely resolved in the light microscope. Therefore, the blurring of the structures results in a low-contrast structure with medium gray values [38]. The second most important parameter is the density of the substructure. It is the only parameter that contains information from the SEM in addition to light-microscopic information. The extension of the microscopy methods by the electron microscopy has improved the classification of different phases also by material science experts. In the SEM, the very fine structures of the bainitic and martensitic structures can be resolved and the differences between the phases can be made visible [6,7]. In order to use this information for classification, the substructure density parameter is evaluated for each object. This adds a simple texture parameter with electron microscopic background to the morphology of the phases. The density of the substructure is shifted to smaller values for bainitic structures in our data, as these consist of individual cementite particles that are distributed inside the objects and do not have lamellar or network structures such as pearlitic or martensitic structures with higher densities.

When 27 parameters are used and the data is split sample-wise, the test performance of the classification and the kappa values show lower accuracy for the given data. In case of a sufficiently large database the advantage of sample-wise data splitting is that it usually leads to models that are less susceptible to fluctuations within a class and show better generalization properties. However, a sufficiently large database must be available so that the training data can represent a maximum of diversity of a class. This is because different samples of the same class always show small variations. A large group of samples is therefore best suited to represent the variety of variants in a class. For a data set in combination with a sample-wise data split this means that part of the information of the data set on the variation of classes is lost for the data mining model. In this work, the given data set seems not sufficient to

allow for the advantages of a sample-wise data split. The number of objects for training using a sample-wise data split is 2511, 30% less than the training dataset used for the shuffled data, which consists of 3583 objects. This leads to less variation in microstructures in the training data with a low generalization of the trained model with low performance values. In addition, the large amount of parameters compared to the amount of objects leads to an overfitting model. This is indicated by the significant difference between test and training accuracy. Overfitting means that a model describes noise instead of the underlying relationship. This occurs when a model begins to adapt to random variations in the training data rather than generalizing from tendencies. Usually the overfitting of the model results in a poor prediction performance, due to a high sensitivity to minor fluctuations in the training data [39]. The high values for C might be an additional indicator that there is some overfitting in our data mining model. In order to avoid overfitting of the model and improve the generalization, more data and a greater variation of samples are needed. Overall it can be seen that on the given data a shuffled data split lead to models that at the same time show higher generalization, less complexity because of fewer parameters and a higher classification performance.

Moreover, the results in Table 6 demonstrate that the classification of martensite objects works well with a rate of wrongly classified objects of 5.80%. The classification of pearlite and bainite is considered to be satisfying. For these classes, a higher fraction of objects was assigned to the martensite class and therefore classified incorrectly. One reason for this could be that although normally all three phases have different morphological properties; sometimes they look similar on binary images. This is the case especially when the object areas are below 5 μm^2 , as demonstrated in Fig. 7 where non-typically objects for the three classes are shown whose area is smaller than the critical area. In this case, the form parameters, the density and the gray value ratio show similar values for all three classes.

In contrast, larger objects show typical appearances of the phase and are therefore easier to identify. For this reason, some small pearlitic and bainitic objects can be falsely classified as martensitic, as shown in Table 6. Therefore, a distinction between different phases based on the deduced morphological parameters cannot always be evaluated. The substructure density and gray value ratio parameters indicate that parameters describing the substructure of the objects are of great importance for the classification. In order to get a better distinction among the different types of second phase, it is important to find parameters which represent the substructure of the second phase objects more precisely like the lamellar structure of typical pearlite [17]. Furthermore, the fact that the data mining model has classified more martensitic objects than objects of the other two phases is related to the different amount of data available for the different classes. The high classification accuracy of the martensitic phase demonstrates that more data and more variation results in higher classification accuracy and in a better generalization of the data mining model. This tendency can also be seen from the classification results of sample-wise split data trained with less data. For all these reasons, more data is needed to get better statistics in general and to balance the amount of objects for the different classes.

To sum up, the results of the classification indicate that morphological parameters of the objects form a good basis for a classification, but solely are not enough to distinguish between different classes, especially if the data is split sample-wise. The morphological parameters that were most important for classification, the gray value ratio and the substructure density, both already contain information on the substructure. Therefore, additional parameters of the substructure are used to improve classification performance, especially for the pearlite and bainite classes.

The results of these substructure parameters demonstrate that pearlite and martensite can be classified successfully based on the binarized substructure. However, the classification performance for the bainite is still much lower than for the two other classes, as shown in

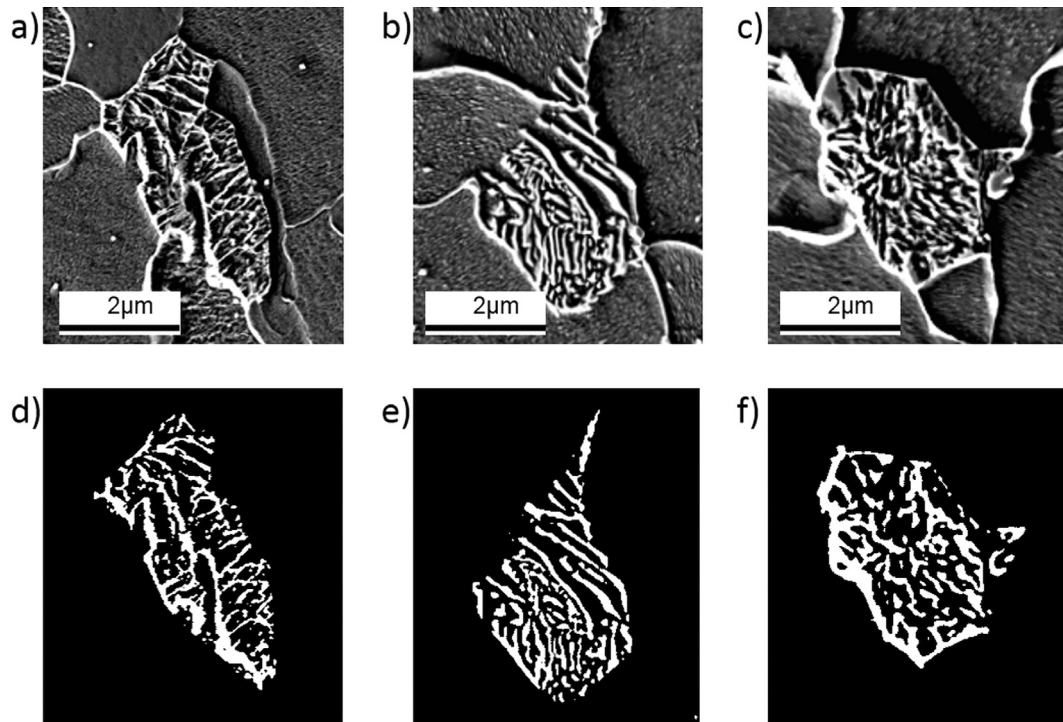


Fig. 7. Representative scanning electron microscopy images of a non-typical martensitic (a), a non-typical pearlitic (b) and a non-typical bainitic (c) object as well as corresponding binary images used to compute the area density of the substructure in an object (d–f).

Table 8. Most likely it results from the variance of structures representing this class [7]. Nevertheless, the performances of the classification based on substructure parameters show a high accuracy rate with 10 parameters.

It can be deduced from these results that the most important parameters contain meaningful information for a further differentiation of the predefined phases. In the case of the substructure, above all the mean length and areas and their standard deviation of the objects, are a suitable measure to distinguish the microstructure classes, as shown in Fig. 6. For example, the individual sub-objects of pearlite objects with the typical cementite lamellas have high feret maximum and fiber length values in the binary images, whereas the shape factor reaches small values due to its elongated morphology. In comparison, bainitic structures with finely distributed cementite precipitates have rather round particles in binary images with large shape factors and small areas with a more homogeneous ratio of feret maximum and minimum [7]. The network-like etching structure of martensite shows large values in area and fiber length for the binary structure. Thus, these parameters provide the basis for further differentiation parameters, which can be used in addition to the morphological parameters of the objects. The results indicate that the parameters of the substructure can help to further improve the accuracy. Nevertheless, it is important to note that comparable results for the substructure parameter out of the segmentation are only possible with reproducible etching and comparable segmentation methods. However, in this initial study, only representative substructure objects with areas greater than $5 \mu\text{m}^2$ were considered for the different classes in order to produce the data in the first step. This leads to higher accuracy of the classification compared to using all objects because the model can be built with characteristic data. In the next step, the substructure parameters for all second-phase objects should be measured and tested in the SVM model so that the various appearances of the substructure in one class is included in the data. Furthermore, the different parameters for second-phase objects and substructures have to be combined in one model and the significant parameters of both have to be found in order to improve the classification accuracy. However, such information could also be used to

further improve classification results. For the initial tests using morphological parameters for a microstructure classification in steel, the parameters show a good performance for second-phase objects and for the substructure.

The study shows that this data mining process can distinguish between different classes of steel based on light optical and SEM images. This is one of the major advantages of this approach in comparison with EBSD-based classification, which is extremely time-consuming and cannot be used in daily quality control. This method allows closing the gap between the subjective metallographers classification and the precise EBSD classification. Additionally, the combination of a classification by using data mining methods and morphological parameters can help to understand the important parameters for different classes and could be used for quantitative microstructure analysis. Another important point to mention in this study is that the assignment of the images to each microstructure class (the so-called ground truth) was made by materials experts before the classification step. This means that in the first step the knowledge of the model is based on expert opinions. The application of the model remains the same so that the classification results have the same fundamental error. Due to that the classification results are independent of the user's knowledge and personal opinion. In order to find a completely objective way without relying on a preclassification by experts, data mining methods could be used to identify different classes in case of unsupervised learning and using other data mining methods like CNNs. Furthermore, new parameters for the substructure could be developed and tested. Otherwise the models could be extended by using EBSD data which could be integrated in the data mining process under the condition that sufficient data is available for the database. In addition, the bainitic class allocated all objects that are neither martensite nor pearlite. So the bainitic class has to be divided into subclasses according to Zajac et al. [6] and Gerdemann [10], enabling the model to distinguish more precisely between different types of bainite. In the future three dimensional structures could help to collect large amounts of data and offer the opportunity to cut the objects in different levels so that the connection to the polished surfaces of the samples is possible. In addition,

parameters from other techniques like EBSD could be added to the database in order to further improve the precision of the classification.

5. Conclusion

The results of the present work demonstrate the feasibility of an objective classification of different structures in steel on the basis of morphological parameters by data mining methods. The process in Rapid Miner with the SVM as classifier showed good classification results for the three classes martensite, pearlite and bainite. We were able to show how to develop a process for the classification of microstructures. Furthermore, data preprocessing and feature selection could at the same time improve the classification results in order to make the model less complex and increase the generalization. Additionally, we found significant differences in the results between shuffled data split and sample-wise data split. The integration of substructure parameters in the classification process has shown high accuracy using fewer parameters. Comparable results for the morphological microstructural parameter were only possible with reproducible etching and segmentation methods. In order to further improve the accuracy, characteristic parameters of the second-phase objects and the substructure could be combined and more data should be produced in order to get statistically sufficient results and improve generalization.

References

- [1] C.C. Tasan, M. Diehl, D. Yan, M. Bechtold, F. Roters, L. Schemmann, C. Zheng, N. Peranio, D. Ponge, M. Koyama, K. Tsuzaki, D. Raabe, An overview of dual-phase steels: advances in microstructure-oriented processing and micromechanically guided design, *Annual Rev. Mater. Res.* 45 (1) (2014) 391–431.
- [2] N. Sato, Y. Adachi, H. Kawata, K. Kaneko, Topological approach to ferrite/martensite dual-phase microstructures, *ISIJ Int.* 52 (7) (2012) 1362–1365.
- [3] P. Khedkar, R. Motagi, P. Mahajan, G. Makwana, A review on advance high strength steels, *international journal of current engineering and technology, Special Is* 6 (2016) 240–243.
- [4] G.F. Vander Voort, *Metallography: Principles and Practice*, McGraw-Hill, New York, 1984, pp. 216–217.
- [5] E. Beraha, B. Shpigler, *Color Metallography*, American Society for Metals, 1977.
- [6] S. Zajac, J. Komenda, P. Morris, Quantitative structure-property relationships for complex bainitic steels, ECSC- 247, Draft final report, 2004.
- [7] S. Zajac, V. Schwin, K.-H. Tacke, Characterisation and quantification of complex bainitic microstructures in high and ultra-high strength linepipe steel, *Mater. Sci. Forum* (2005).
- [8] 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.
- [9] H.K.D.H. Bhadeshia, R.W.K. Honeycomb, *Steels – Microstructure and Properties*, Elsevier Ltd., Cambridge, 2006.
- [10] F.L.H. Gerdemann, *Bainite in Medium Carbon Steels*, Shaker Verlag, Aachen, 2010.
- [11] D.G. Lowe, Distinctive Image Features from Scale-Invariant Keypoints, *Int. J. Comput. Vis.* (2004).
- [12] A. International, *Practical Guide to Image Analysis*, ASM International, (2000).
- [13] J. Ohser, F. Mücklich, *Statistical Analysis of Microstructures in Materials Science*, Karlsruhe, Saarbrücken, 2001.
- [14] M.P. Aarnts, R.A. Rijkenberg, F. Twisk, *Microstructural Quantification of Multi-phase Steels (Micro-quant)*, Brussel, 2011.
- [15] A. Velichko, *Quantitative 3D Characterization of Graphite Morphologies in Cast Iron using FIB Microstructure Tomography*, Shaker Verlag, Saarbrücken, 2009.
- [16] R.J. Roiger, *Data Mining: A Tutorial-Based Primer*, Taylor&Francis Group, 2017.
- [17] X. Liu, *Microstructural Classification of Pearlitic and Complex Phase Steels Using Image Analysis Methods*, Birmingham, 2014.
- [18] 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.
- [19] A.C. Chowdhury, E. Kautz, B. Yener, D. Lewis, Image driven machine learning methods for microstructure recognition, *Comput. Mater. Sci.* 123 (2016) 176–187.
- [20] N. Lubbers, T. Lookman, K. Barros, Inferring low-dimensional microstructure representation using convolution neural networks, *Phys. Rev. E* 96 (2017) 052111.
- [21] S.M. Azimi, D. Britz, M. Engstler, M. Fritz, F. Mücklich, Advanced steel microstructure classification by deep learning methods, *Sci. Rep.* 8 (1) (2018).
- [22] 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.
- [23] D. Britz, J. Webel, J. Gola, F. Mücklich, A Correlative approach to capture and quantify substructures by means of image registration, *Practische Metallographie* 54 (10) (2017) 685–696.
- [24] N. Harste, *Objektive Gefügeklassifizierung von Dual-Phasen-Stählen mittels DataMining*, Saarbrücken, 2014.
- [25] *Usermanual AxioVision*, Zeiss.
- [26] *Usermanual A4i applications for imaging*, Aquinto.
- [27] M. Hofmann and R. Klinkenberg, *RapidMiner: Data Mining Use, Cases and Business Analytics Applications*, 2014.
- [28] I. Guyon, A. Elisseeff, Special issue on variable and feature selection, *J. Mach. Learn. Res.* 3 (2003).
- [29] B. Schowe, *Feature Selection for high-dimensional data with RapidMiner*, Dortmund, 2011.
- [30] A. Ben-Hur, J. Weston, A user's guide to support vector machines, *Data Min. Techn. Life Sci.* (2010) 223–239.
- [31] C.W. Hsu, C.C. Chang, C.J. Lin, *A Practical Guide to Support Vector Classification*, National Taiwan University, Taipei, 2010.
- [32] J. Weston, C. Watkins, *Multi-class support vector machines*, Royal Holloway technical report CSD-TR-98-04, 1998.
- [33] J. Davis, M. Goadrich, The Relationship between Precision-Recall and ROC Curves, in: *Proceedings of the 23rd International Conference on Machine Learning, ICML '06*, 2006.
- [34] M.J. Ortiz, A.R. Formaggio, J.C.N. Epiphonio, Classification of croplands through integration of remote sensing, GIS, and historical database, *Int. J. Remote Sens.* 18 (1) (1997) 95–105.
- [35] G.H. Rosenfield, K. Fitzpatrick-Lins, A coefficient of agreement as a measure of thematic classification accuracy, *Photogram. Eng. Remote Sens.* 52 (2) (1986) 223–227.
- [36] M. Sokolova, G. Lapalme, A systematic analysis of performance measures for classification tasks, *Inf. Process. Manage.* 45 (2009) 427–437.
- [37] J. Richard Landis, Gary G. Koch, The measurement of observer agreement for categorical data, *Biometrics* 33 (1) (1977) 159–174.
- [38] H.K.D.H. Bhadeshia, *Bainite in Steels*, second ed., London, 2001.
- [39] D.M. Hawkins, The problem of overfitting, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* 44 (1) (2004) 1–12.

5.3 Publikation II

A new analysis approach based on Haralick texture features for the characterization of microstructure on the example of low-alloy steels

Johannes Webel, Jessica Gola, Dominik Britz, Frank Mücklich

*Chair of Functional Materials, Saarland University, Material Engineering Center Saarland, Campus D.3.3, 66123 Saarbrücken, Germany

Publiziert in: “**Materials Characterization**“, Volume 144, October 2018, Pages 584-596

Verwendet in der Arbeit mit der Erlaubnis von Elsevier.

Online zugänglich unter: <https://doi.org/10.1016/j.matchar.2018.08.009>

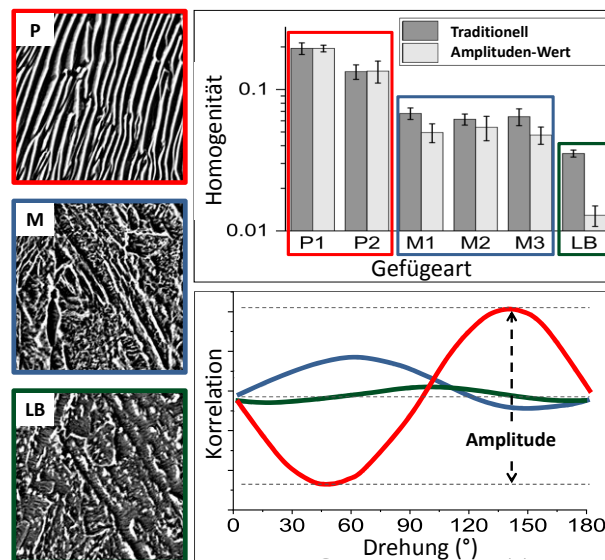


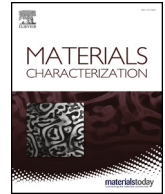
Abbildung 5.2: Graphical Abstract Publikation II.

Zu zitieren als:

J. Webel, J. Gola, D. Britz, and 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., vol. 144, pp. 584–596, 2018. (<https://doi.org/10.1016/j.matchar.2018.08.009>)

Autorenerklärung nach Brand et al.: [188]

Johannes Webel: Conceptualization, Methodology, Software, Validation, Formal Analysis; Investigation, Data Curation, Writing – Original Draft; **Jessica Gola:** Conceptualization, Methodology, Investigation, Data Curation, Writing – Original Draft, Visualization; **Dominik Britz:** Conceptualization, Methodology, Writing - Review & Editing, Supervision, Project Administration; **Frank Mücklich:** Conceptualization, Resources, Supervision, Funding Acquisition



A new analysis approach based on Haralick texture features for the characterization of microstructure on the example of low-alloy steels



Johannes Webel*, Jessica Gola, Dominik Britz, Frank Mücklich

Saarland University, Chair of Functional Materials, Campus D3 3, 66123 Saarbrücken, Germany

ARTICLE INFO

Keywords:

Haralick image texture
SEM
Microstructure characterization
Low-carbon low-alloy steel
Lower bainite
Lath martensite

ABSTRACT

Microstructures were analyzed by an improved texture-based method using gray level co-occurrence matrices (GLCM). This method is based on a new parameter calculated from the stepwise rotation of images and thereby, calculating the values independent of the original texture orientation. The proposed method was applied on a database of etched and scanning electron microscopy (SEM)-imaged low-carbon steel microstructures that are currently extensively used for automated microstructure classification. The results on the microstructures consisting of pearlitic, lath martensitic and lower bainitic constituents revealed that the method allows a significant separation of various types of microstructures in the ideal case of square-shaped cutouts. For complete grains of the corresponding second phases, the results imply that the application of a classifier is advantageous to distinguish them with a sufficient accuracy. The robustness and workability of the method was further demonstrated by discussing the effect of varying the image resolution and contrast/brightness settings during image acquisition. It was shown that such user-dependent setting parameters do not impair the separability of the steel constituents by using the proposed method.

1. Introduction

For future tasks in energy, infrastructure and safety, materials with tailored specifications are necessary. The properties of the materials are controlled by the processing parameters and correlated with the resulting microstructure. In addition to the quantitative analysis of the arrangement, shape and area of the phases, it is also decisive which constituents are present in the microstructure. The clear quantification of these phases is still a big challenge for materials science experts, especially in the field of low-carbon steels where multiple phases are present in a single microstructure.

Fast and reliable differentiation between martensite and bainite is quite problematic and there have been many different approaches to tackle that problem [1–12]. Although discrimination has been possible for a long time by using high-resolution electron microscopy on etched surfaces [12] or in transmission [13–15], these methods are highly cost- and time-consuming and not conducive for daily industrial practice. Therefore, indirect techniques have been developed over time with the aim to make the steel constituents discernible.

Among these, light optical microscopy (LOM) is still the most readily available technique used for steel quantification. Usually, color metallography is used to differentiate complex phase mixtures by their

color appearance [6–9,11,16–18]. The analyzed steels generally have higher alloy content leading to the characteristic colors but for low-alloyed steels this is not the case. Because of increased complexity and decreased size of the constituents, the resolution of LOM is not sufficient any longer to separate the marginal differences between the steel phases – especially in the case of bainite and martensite.

To overcome the limit of resolution given by LOM, scanning electron microscope (SEM)-based techniques are increasingly used for steel characterization. One technique in SEM is electron backscatter diffraction microscopy (EBSD), which has been demonstrated to be a powerful tool [1,2,4,5,12,19] in steel characterization. In addition to its higher resolution compared to LOM, it benefits from the fact the steel transformation products like pearlite, martensite and bainite differ theoretically - owing to their formation mechanism - in their defect structure [1]. Moreover, special orientation relationships can be exploited for a phase separation [12]. For example, Gourges et al. [5] and Zajac et al. [12] showed that in the particular case of plate steels, the misorientation profile of martensite and bainite is different. While upper bainite has a high proportion of low angle misorientation, lower bainite has most laths misoriented at 55° and larger. The distinction between lower bainite and martensite is not possible as the misorientation profile is very similar for the two morphologies [5]. One

* Corresponding author.

E-mail addresses: j.webel@mx.uni-saarland.de (J. Webel), jessica.gola@uni-saarland.de (J. Gola), d.britz@mx.uni-saarland.de (D. Britz), muecke@matsci.uni-sb.de (F. Mücklich).

<https://doi.org/10.1016/j.matchar.2018.08.009>

Received 18 May 2018; Received in revised form 5 August 2018; Accepted 5 August 2018

Available online 07 August 2018

1044-5803/ © 2018 Elsevier Inc. All rights reserved.

drawback of the EBSD technique is its limited sensitivity to fine carbide precipitation in steel, like cementite. However, they are very important to identify certain constituents in low-carbon steels [12,19].

Fortunately, recent advance in adequate etching [17] and high-resolution imaging in SEM make analysis methods feasible that include also image texture. This has already been shown to have a high potential for steel microstructure characterization [10,20–23].

Image texture is the “*spatial arrangement of color or intensities in an image*” [24] and image texture-based analysis methods have been used for image analysis in fields like satellite image classification [25–28] or biomedicine [29]. In the steel community, they can be powerful microstructure descriptors since they are comparatively fast and inexpensive. For instance, Gabor filters have been applied to detect defect structures in steels [30]. By using a multi-dimensional Gabor filter, quantitative values for feature morphology can be derived and used for feature classification [31]. This was used for the classification of carbide distributions in steel by using LOM images. Consequently, ratios for the horizontal-to-vertical energy to estimate the degree of carbide orientation were derived. The fact that the carbides stretched into the rolling direction was exploited by aligning the sample with respect to the image horizontal. The complicating issue for substructures of the various steel constituents is that they do not necessarily orient in the same direction but form in relation to the crystal orientation of the parent austenite grain.

Methods using Fourier transformation are reported to be very effective on regular structure segmentation like pearlite [10] but they fail for noisy images [32] and therefore, are not applicable for SEM images. It is reported [33] that image noise has little influence on the performance of texture analysis with the so-called gray-level co-occurrence matrices (GLCM), originally used by Haralick et al. [27]. Fuchs et al. [21] used the texture feature derived from GLCM to describe the hardening in steel surfaces. Other authors used it for the segmentation of LOM micrographs of multiphase steels via a classification step and reported it to be effective for two-phase steels but not multiphase steels [10]. Dutta et al. [22] showed that the variation of tempering parameters in a fully martensitic steel has a marked influence on the GLCM features of the image texture of representing SEM micrographs.

The use of GLCM features on etched steel microstructures imaged in SEM is promising since the gray-level distribution is very different for the various microstructures on a global scale. Texture features calculated from GLCM are constructed from pixel neighborhood relations in the horizontal, vertical or in the direction of the two image diagonals [27]. As images of the microstructures acquired by microscopy will naturally scatter in image texture orientation from user-to-user, as well as because of different crystallographic orientations within one sample, this will lead to varying texture values even for the same microstructures. Rotation-invariant texture descriptors such as the local binary pattern (LBP) histogram introduced by Ojala et al. [34], can measure the local texture and contrast, but it cannot capture the higher-scale information of structure. Guo et al. [35] therefore combined LBP with a histogram matching to also include global texture orientation into their classification scheme. The orientationally matched and shifted LBP histograms could then be classified based on their differences. But the method will be problematic for textures that do not have any clear orientation to match, which is the case for many of the steel microstructures investigated in the present work.

For evaluation and ensuring good comparability of the image texture of the microscopy images, error-free preparation and adapted etchings are imperative. Because of that, SEM image data must be treated carefully. Owing to limited acquisition time, the grayscale images, which are constructed from point-to-point scanning of an electron beam over the sample surface and the resulting signal intensity of the scattered electrons on the detector, also contain the detector noise. Furthermore, as in the case of the secondary electron contrast, the image results mainly from surface topography which is not only the result of the etched microstructure, i.e. grain/lath boundaries and

precipitation, but also all surface artifacts such as scratches, contamination or (local) over-etching. Therefore, the preparation route of the metallographer has a big influence on the visual appearance of the microstructure in SEM. Additionally, etching results depend heavily on the laboratory environment [36]. Due to these issues, standard segmentation algorithms by simple thresholding are usually ineffective in separating the microstructural constituents in steel.

Once the etching has been adjusted and an artifact-free preparation route is established, the regions where the texture analysis will be performed must be determined. In the case of SEM images of multiphase steels with ferritic regions, a threshold level segmentation – typically used in the quantitative microstructure analysis of LOM images – is not possible. The reason is that the ferritic regions show different etch attack corresponding to their crystallographic orientation [37] and this manifests itself in a fine topography contrast in SEM. Since the contrast of the substructure in the carbon-rich phase also mainly results from topography, it is therefore not possible to separate the carbon-rich constituents from the ferritic regions of steel in SEM images simply by applying a threshold level.

A way to overcome this limitation in SEM is to combine images made by different sensors and separate microstructural constituents in a correlative approach of SEM and LOM, as done by Britz et al. in the case of two-phase plate steel microstructures comprised of a ferritic matrix and carbon-rich constituents [38]. Once separated, the substructure of isolated grains can be analyzed using quantification tools. For example, Gola et al. used morphological parameters of single grain objects and their substructure morphology as data to build a classification scheme via a support vector machine (SVM) [20]. A SVM is a binary classification method that takes labeled data from different classes as an input and outputs a model for classifying new unlabeled data into different classes [39]. The inclusion of additional image texture information is promising for further improvement of the SVM performance. In a new approach using a convolutional neural network, the image textures of steel microstructures in SEM have been used to detect and classify regions containing different constituents [3].

The goal of this work is to distinguish between different microstructures based on an improved Haralick image-texture features method. The method calculates a rotation-invariant value with a new approach that uses an image rotation of isolated microstructural objects. This method is applied to the problem of multi-component steel characterization to distinguish the typical constituents, pearlite, martensitic and bainite. The industrial applicability will be discussed by also considering critical user-dependent settings: image resolution and image contrast/brightness. By this approach, valuable information for the distinction of microstructure constituents can be gained.

2. Experimental

2.1. Material

For this study, five images each from six different low-alloyed low-carbon thermo-mechanically rolled steels were acquired using SEM. The samples were produced with different final cooling rates and consisted of two constituents: each ferrite and another carbon-rich steel constituent. Two ferritic-pearlitic sample sets (P1 and P2), three ferritic-martensitic sample sets (M1, M2 and M3) and one ferritic-bainitic set (LB) were used. Fig. 1 shows example images for each of the used sample sets (a full list of all used images is given in the Supplementary materials). P1 (Fig. 1a) was a pearlite sample with straight lamellae, whereas P2 (Fig. 1b) had a more irregular pearlitic structure. M1 and M2 (Fig. 1c and d) are lath martensite samples with smaller martensite packets inside. This contrasts with M3 (Fig. 1e), where the whole of the grains seemed to be built up by a single packet and the martensite had a very regular lath-like structure, which resembled also bainite. LB was a lower bainitic sample. Fig. 2 displays a higher magnification image of LB showing intra-lath carbide precipitation typical for lower bainite

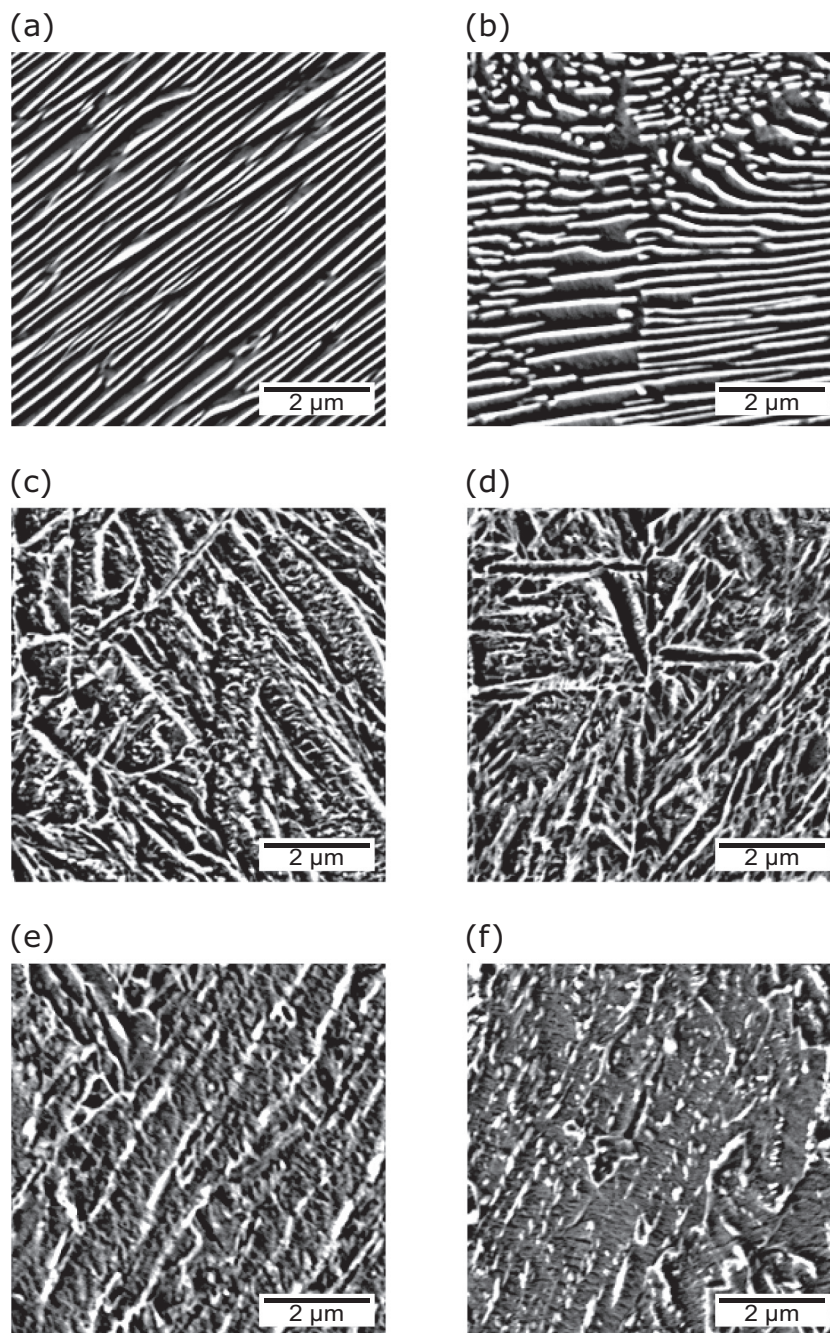


Fig. 1. Representative SEM images of the investigated steel constituents a) P1, b) P2, c) M1, d) M2, e) M3 and f) LB. Etching was done using a 3% - aqueous sodium metabisulfite solution.

[13]. A summary of the sample nomenclature is provided in Table 1.

2.2. Sample Preparation

The samples were ground using 80–1200 grid SiC papers and then subjected to 6, 3 and finally, 1 μm diamond polishing to obtain smooth surfaces for subsequent etching. Etching was carried out using a 3% aqueous potassium metabisulfite etchant that has shown excellent results for low-alloyed low-carbon steel characterization before [17].

2.3. Microscopy

Each sample was imaged in a Zeiss Merlin FEG-SEM using secondary electron contrast with an image size of 4096×3072 pixels and a

horizontal field width of 111 μm . Images were taken in the plate quarter section to find representative microstructures for each of the sample classes and to avoid center line segregations. The magnification and imaging conditions chosen for the present work results from a previous one [20], where especially big areas of the microstructure were imaged for microstructure classification with machine learning. Images were taken with an Everhart-Thornley detector and the SEM was operated at an acceleration voltage of 5 kV, a probe current of 300 pA and a working distance of 5 mm. Also, all the images were acquired with the same image contrast and brightness settings in the SEM. Furthermore, we aimed to get the gray level histogram as good as possible inside the gray range, lest it be cut or too narrow. Because the image contrast also depends on the intensity of etching and sample preparation, all images were subsequently normalized with regard to their gray value

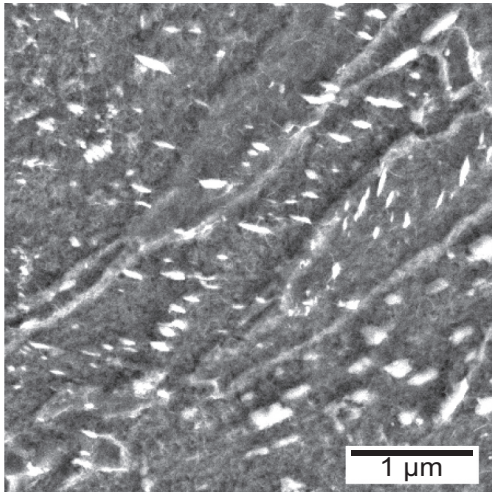


Fig. 2. High magnification image of the lower bainite sample displaying typical intra-lath carbide precipitation.

Table 1
Steel constituent nomenclature.

Abbreviation	Steel constituent
P1	Pearlite
P2	Pearlite
M1	Martensite
M2	Martensite
M3	Martensite
LB	Lower bainite

histogram. Proper care was taken to crop the analyzed image samples always from the middle region of the SEM images to avoid differences in the illumination conditions.

2.4. Analyzed Image Samples

The analysis is divided in two parts: first, square-shaped sample images, as displayed in Fig. 1, cropped from inside the carbon-rich constituent have been analyzed to obtain data only from the sub-structure and not surrounding ferrite, grain boundaries and artifacts. In this context, this is referred to as the ideal case. Second, complete microstructural objects have also been analyzed to compare their data to the ideal case.

In each case, 5 square images were cropped out. For the ideal case, the image size was 256×256 pixels (27.9 nm/pixel).

As far as complete objects are concerned, the procedure presented by Britz et al. [38] was used to exclude the surrounding ferrite from the analysis. Ferrite and the carbon-rich constituent could be separated by a correlation of SEM images with the corresponding LOM images of etched multi-phase steels, as demonstrated in Fig. 3.

The resulting image size of these complete carbon-rich grain objects was not kept constant, but smaller or higher than 256 pixels in height and width. In Fig. 4, example objects for each class are displayed.

2.5. Image Texture Analysis

The image texture was analyzed using a modified method originally developed by Haralick et al. [27]. For this, the gray level co-occurrence matrix (GLCM) [27] of each sub-image was calculated. The GLCM elements are composed of the number of certain gray value co-occurrences of pixel pairs with a certain distance and direction to each other. By standard, the direction is defined as 0° (with respect to the direct pixel neighborhood in the horizontal direction of the image), but also

the 90° direction and a diagonal calculation of the pixel pairings are possible (45° and 135°). The size of the GLCM matrix is 256, representing each gray value of the 8-bit SEM images.

For the presented work, the four image texture features correlation, contrast, energy and homogeneity were calculated from the GLCM [27], which are implemented in the MATLAB®-software. Contrast [27] is a measure of the local gray level variations in an image and is calculated as:

$$\text{Contrast} = \sum_{n=0}^{N-1} n^2 \left(\sum_{|i-j|=n} P(i,j) \right),$$

with N being the number of gray levels in the image, and $P(i,j)$ being the normalized probability of pixel pairings with the gray level i and j .

Correlation is expressed as a measure of the gray level linear dependency between the pixels at the specified positions relative to each other [40]. It is defined as:

$$\text{Correlation} = \sum_i \sum_j \frac{P(i,j)[(i - \mu_x) \cdot (j - \mu_y)]}{\sigma_x \sigma_y},$$

where μ_x and μ_y are the mean value of every row and column of the GLCM respectively, and σ_x and σ_y , their respective standard deviations [40].

Energy [22] is mathematically defined as:

$$\text{Energy} = \sum_i \sum_j P(i,j)^2,$$

and is a measure of the uniformity of the gray level distribution in an image [22]. Energy is high when there are few entries in the GLCM that have high probability.

Homogeneity [22] is defined as:

$$\text{Homogeneity} = \sum_i \sum_j \frac{P(i,j)}{1 + |i - j|}.$$

It can be described as an inverse to the contrast of an image, as only entries close to the diagonal of the GLCM have a big impact on the homogeneity value.

In the original approach, the texture features were calculated from GLCMs constructed from pixel pairings in orientations of 0° , 45° , 90° and 135° [27]. An average value as well as the range for all four spatial orientations were recommended. In the current work, instead of averaging/ranging the four spatial orientations of the pixel pairings, the analyzed image was rotated step-wise in 1° -steps from 0° till 180° and the GLCM of the respective horizontal pixel pairings was constructed at each step. This algorithm is explained as follows: first, the cropped images were centrally added to a blank frame which was big enough to incorporate the cropped image for every rotation angle without cutting out the edges of the image [38]. Second, the GLCM of this added image was then calculated for every rotation increment. Third, to exclude the pixels of the black frame from the analysis, the original 8-bit cropped images were enlarged in grayscale range and a gray level of 1 was added so that the darkest pixel of the cropped image was 1 and the brightest, 256. The black frame around each isolated object was thereby simply omitted by deleting the first row and first column of the respective GLCM matrix.

Subsequently, both the amplitude and the mean of the image texture features over the 180° rotation were calculated to include the specific orientation characteristics of the investigated steel constituents into the steel characterization. The amplitude here is defined as the difference between the maximum and minimum of a certain texture feature of all 180 rotated images and the mean describes the average of all these 180 values. To mitigate the influence of artifacts due to image interpolation after rotation, the image texture values of images with 0° , 90° and 180° rotation were omitted as it was found that these sometimes deviate from values for the other angular rotations.

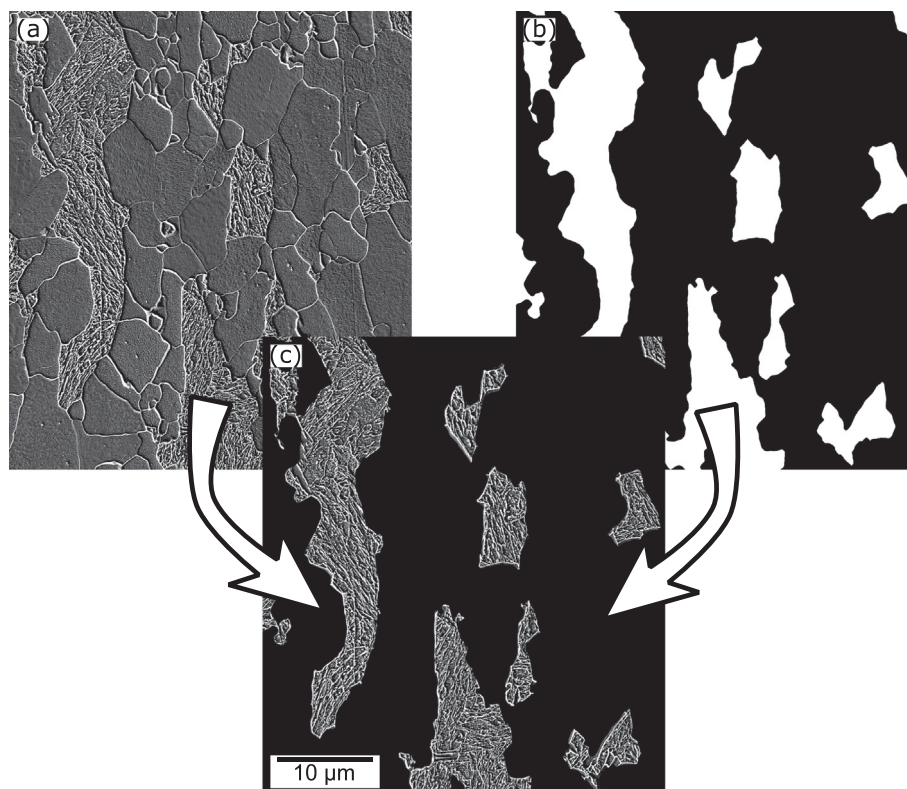


Fig. 3. Isolation of carbon-rich objects (here martensite (M2)) in a ferritic matrix. a) SEM image, b) segmented LOM image with the ferrite in black, and c) the logical addition of SEM and LOM image [38].

3. Results

3.1. Amplitude of GLCM-features

The typical development of both texture correlation mean and amplitude values is shown in Fig. 5 for a pearlitic, martensitic and lower bainitic image example. The amplitude is markedly higher for pearlite, much lower for martensite and nearly zero for the lower bainite example. Also, the maxima of the respective example images are not coincident owing to the difference in feature orientation in each sample. Note that the mean of P1 is lowest although it has the highest amplitude value, whereas bainite and martensite have similar mean values despite their difference in amplitude value. There is also a small jump of values for correlation values at 90° , which is related to the image pixel interpolation during rotation of the images. For 0° , 90° and 180° rotation no interpolation is necessary and therefore, the texture values are slightly different for these positions.

In the original approach of Haralick [27], the mean value and range of a textural feature regarding the pixel pairings in orientations of 0° , 45° , 90° and 135° were proposed. Mean is the average value, and range is the difference between the maximum and the minimum value of the four angular orientations. They are not to be confused with the mean and amplitude value referred to in this text, which are always defined as in the experimental chapter. As we focused on the use of our developed amplitude value in this work, we compared it with the range value proposed by Haralick [27]. Demonstrated on the texture feature homogeneity, Fig. 6a shows the representative values of texture homogeneity over a 180° rotation of three different image samples of set P1. Obviously, the maxima and minima of homogeneity at the specific angles are in correspondence with the different orientations of the pearlitic lamellar structure present for each image, as indicated by white arrows. Taking the range between only the four values at 0° , 45° , 90° and 135° produces values diverging as much as 30%, but if the

amplitude of all values is compared, then the difference between the three samples is only 6%. Therefore, it can be concluded that the amplitude value is better suited than the range value as especially feature orientations that are not close to 0° , 45° , 90° or 135° with respect to the image horizontal give small range values. In accordance with this, the range and the amplitude value for homogeneity for the different sample sets are shown in Fig. 6b. Although both the values show similar tendency, we see that the LB amplitude value is roughly 4 times lower compared to the values of M1–3, and the range values lower than a factor less than 2. Therefore, in the following analysis, only the amplitude value has been considered and compared with the mean of 180 rotation steps.

The amplitude and mean of the image texture features i.e. contrast, correlation, homogeneity and energy as defined above were calculated as shown in Fig. 7.

P1 and P2 show high contrast mean whereas the rest of the samples show lower, similar-like contrast mean (Fig. 7a). LB is only lower in tendency but the standard error overlaps with that of the martensite samples. On the other hand, all the structures produce significantly decreasing texture feature values for contrast amplitude from P1 to LB (Fig. 7b). A visible difference in contrast amplitude value exists between the two pearlite sets, but the values still range high above the next lower values of the martensite sets. The amplitude value of LB is less than 30% of that of the average martensite values.

The different steel constituents have correlation mean values (Fig. 7c) that overlap so that a separation is not possible. Contrarily, the correlation amplitude (Fig. 7d), similar to contrast amplitude (Fig. 7b), has decreasing values from pearlite to lower bainite. Lower bainite especially has a significantly lower correlation amplitude value compared to the other microstructures, being smaller by a factor of around 3 than the martensite sets. The P2 set has values roughly half the values of P1 and therefore overlaps partly with M1–3.

Homogeneity mean (Fig. 7e) values decrease in the order from

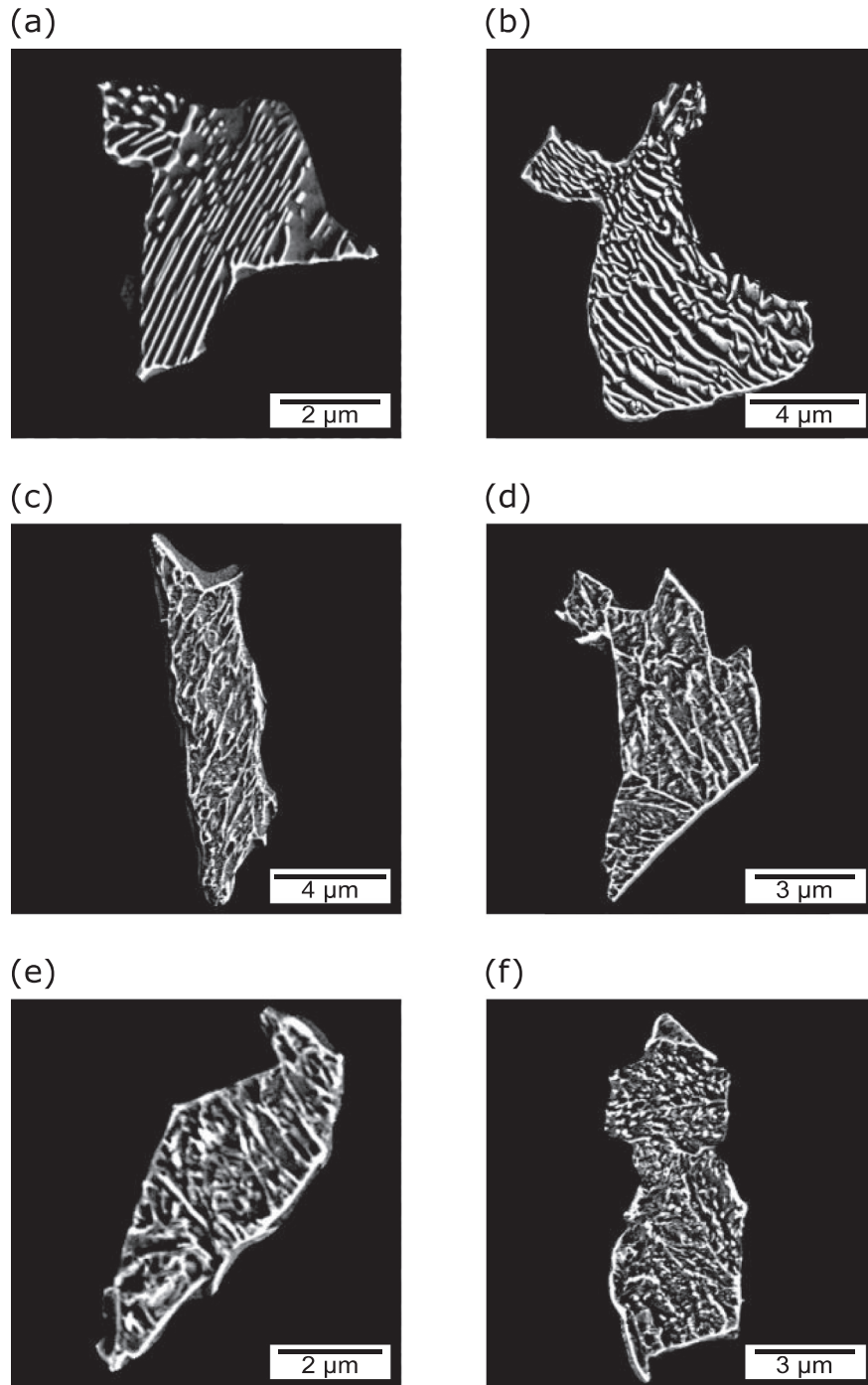


Fig. 4. Selected images of complete objects in SEM of the investigated steel constituents a) P1, b) P2, c) M1, d) M2, e) M3 and f) LB after image addition with the registered and segmented LOM image as a mask [38]. Etching was done using a 3% aqueous sodium metabisulfite solution.

pearlite to lower bainite and are significantly discernible because P1 and P2 are about 2.0–2.5 times higher than the average of M1–3 and the latter, around 1.5 times higher than the values of LB. Other than contrast (Fig. 7a and b) and correlation values (Fig. 7c and d), the decrease of values from pearlite to lower bainite is also visible for the homogeneity mean value (Fig. 7e). Meanwhile, the differences of homogeneity amplitude values (Fig. 7f) are bigger, with P1 and P2 about 2.5–3.5 times higher than M1–2 and the latter, more than 3 times higher than LB.

The differences for the energy values of mean (Fig. 7g) as well as amplitude (Fig. 7h) are analogous to homogeneity values (Fig. 7e and f) and are well pronounced between the pearlite, martensite and lower

bainite. Compared to texture contrast (Fig. 7a and b), correlation (Fig. 7c and d) and homogeneity (Fig. 7e and f), the energy value differences between the investigated constituents are much higher. The difference of mean energy values between pearlite/martensite and martensite/lower bainite are in the order of factor 5 and 8, respectively. More pronounced are the amplitude values, which differ each in the order of a magnitude.

3.2. Complete Object-based Microstructure Analysis

Corresponding to the analysis of the square-shaped sample images, 5 random complete objects of each sample were analyzed after

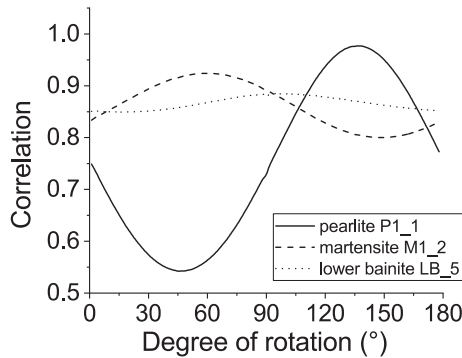


Fig. 5. Change of correlation with rotation angle for a pearlite, martensite and lower bainite image sample.

extracting them from the SEM image, according to an algorithm by Britz et al. [38]. The values of all texture features (Fig. 8) are generally less pronounced for the different sample sets than in the case of the square-shaped images (Fig. 7). For example, P1 and P2 in contrast mean (Fig. 8a) overlap with the values of the martensitic samples, whereas in Fig. 7a they are clearly separated. Also, the square-shaped sample set of LB in average has lower values than M1, M2 and M3 in homogeneity and energy mean (Fig. 7e and g), while it is not the case in the complete object-based analysis (Fig. 8e and g). For amplitude, whole objects generally have texture feature values roughly half of the square-shaped images and consequently, the differences between the steel constituents are also less pronounced. Furthermore, the spread between the values of complete objects is generally higher. This leads to a partial overlap of the texture energy amplitude values of LB and M2 (Fig. 8h). Moreover, all the texture features decrease by a factor of two from pearlite to lower bainite. Conclusively, in the case of complete objects, with the exception of energy, for all parameters the second phases can be separated, but the differences are smaller than for the square-shaped images.

3.3. Influence of Image Resolution

Image resolution is a critical parameter that has a great impact on the acquisition time. Therefore, the texture contrast and energy values obtained from originally high resolved sample images are compared to the values of the respective downscaled images. The original image size is 256 pixels, analogous to the samples as seen in Fig. 2, and their respective average mean and amplitude values are compared to those of images with 128, 64 and even 32 pixels, where no visual identification of a definite morphology is possible (Fig. 9a).

Note that the displayed values of the features for different

resolutions are normalized to the values of P1. That allows a better comparison of the results between the respective resolutions, because the absolute values of the texture features depend on the image resolution [33].

In the case of contrast mean (Fig. 9b), a downscaling of the image resolution nearly has no influence on the relative values between the different sample sets. For contrast amplitude interestingly, it was found that even with the lowest resolution of 32 pixels, it is still possible to separate the sample constituents (Fig. 9b). However, the differences of the values between the different constituents tend to decrease with decreasing resolution, whereas the standard error increases.

For energy (Fig. 9c), ability to distinguish also generally becomes lower with decreasing resolution. For the mean values, the second phases in images with low resolution (32 and 64 pixels) cannot be distinguished. For 128-pixel images, pearlite can be distinguished from the other phases, but not martensite from lower bainite. Only 256-pixel images allow a full separation of pearlite, martensite and lower bainite.

By using amplitude, the energy values of steel constituents are separable down to 32 pixels. But only the images with 128 and 256 pixels produce significant differences.

3.4. Influence of SEM Contrast and Brightness Settings

Even slight changes in the chemical composition are known to produce very different etching response [8,17]. Therefore, although the acquisition settings can be kept the same for imaging the microstructures, image contrast and brightness can vary drastically when the etching conditions are not the same for the different samples [36]. The influence of varying brightness and contrast conditions on the texture feature values were studied by increasing and decreasing the brightness/contrast values alternatively and, simultaneously (Fig. 10a and b). A comparison was made between M1 and LB, because the separation of martensite and lower bainite is most challenging.

It is observed that no separation is possible for any of the used texture features considering the mean values (Fig. 10c), because the standard error overlaps between M1 and LB. On the other hand, amplitude values are very different for all texture features, except energy, where the standard error is high and leads to overlapping between M1 and LB. It was found that the sample case with very high contrast and low brightness (quasi-binary images), produces very high energy amplitudes for LB which deviate strongly from the results for the other settings and is therefore the cause of the comparatively large scatter. This also demonstrates that histogram normalization is probably not crucial for clear differentiation and will not affect the analysis where the acquisition settings are too extreme.

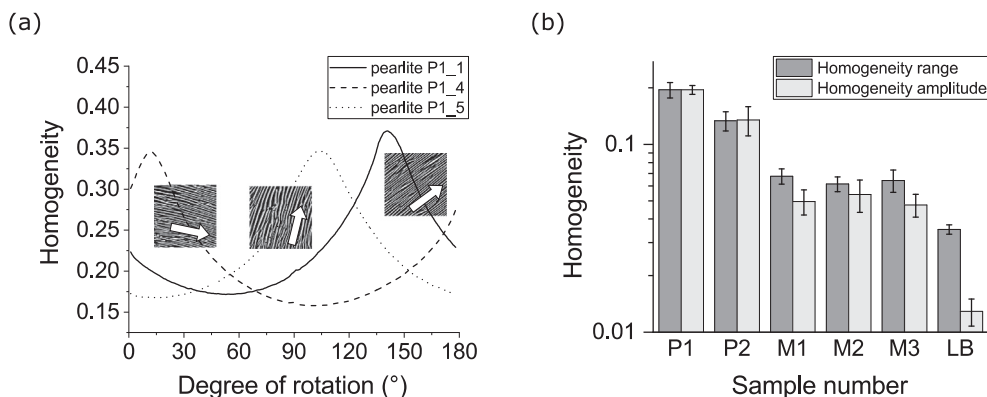


Fig. 6. (a) The variation of homogeneity with rotation angle for three examples of the pearlite set P1. (b) The homogeneity differences (amplitude values normalized to range value of P1) for the respective sample sets with traditional ranging [27] and amplitude after rotation around 180°. Values are in logarithmic scale.

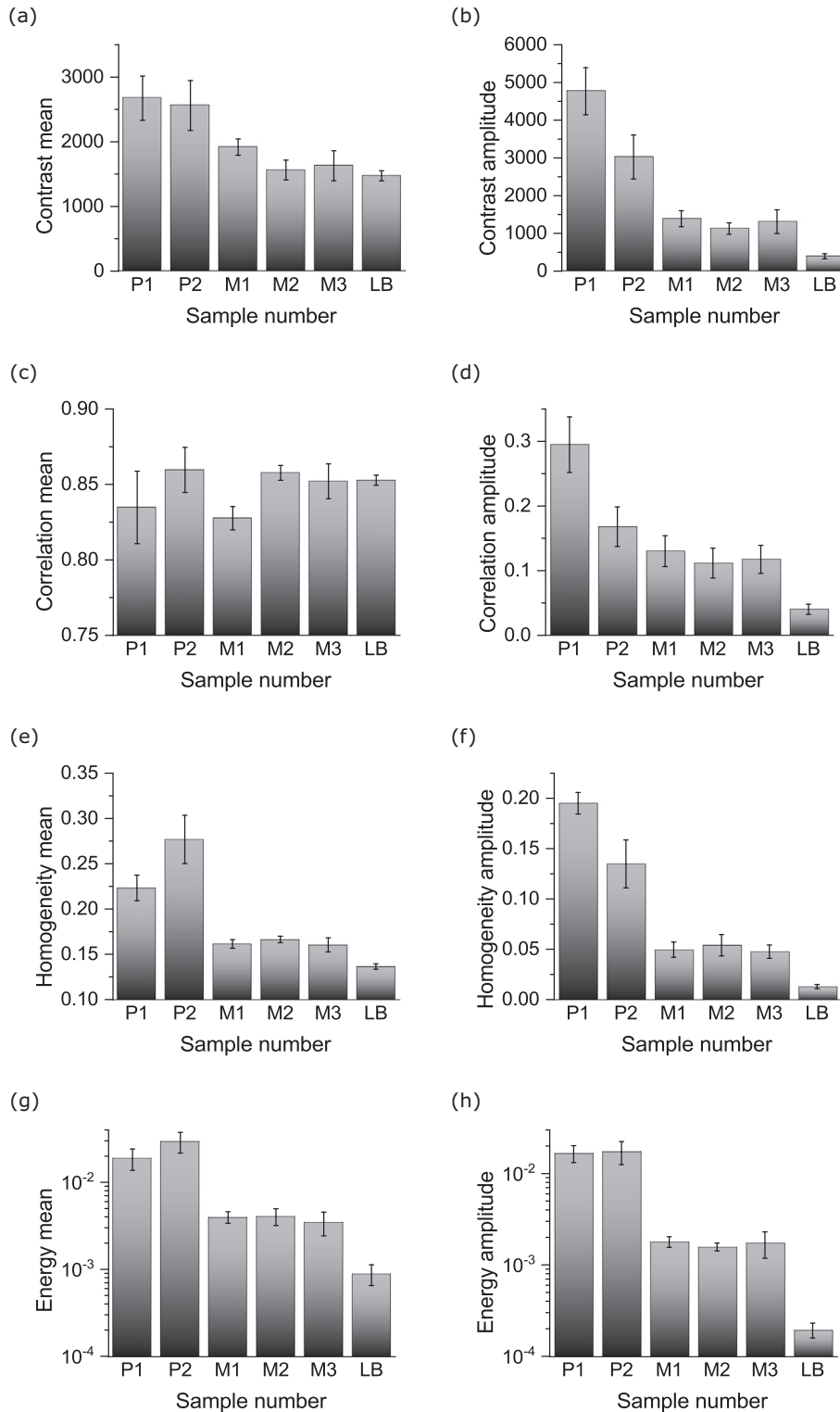


Fig. 7. Mean and amplitude values of the texture features (a–b) contrast, (c–d) correlation, (e–f) homogeneity and (g–h) energy averaged for 5 square-shaped, 256-pixel sample images of the sets P1, P2, M1, M2, M3 and LB, respectively. Energy values are in logarithmic scale.

4. Discussion

While the visual discrimination of the carbon-rich steel constituents, especially martensite and bainite, is a challenge even for the experts, the textural features investigated in the presented work show reproducible and significant differences, which will be discussed below.

The contrast value is highest for pearlite because this structure

particularly has high gray level transitions going from the ferrite to the cementite lamellae and vice versa. This is the result of the aqueous metabisulfite etchant, which also exhibits a structural attack next to the known color etching properties [17]. The electrochemically less noble phase, ferrite, is etched away more quickly, and therefore the protruding cementite lamella block the outgoing secondary electrons, producing a shadowing effect. For the investigated lath martensite, the

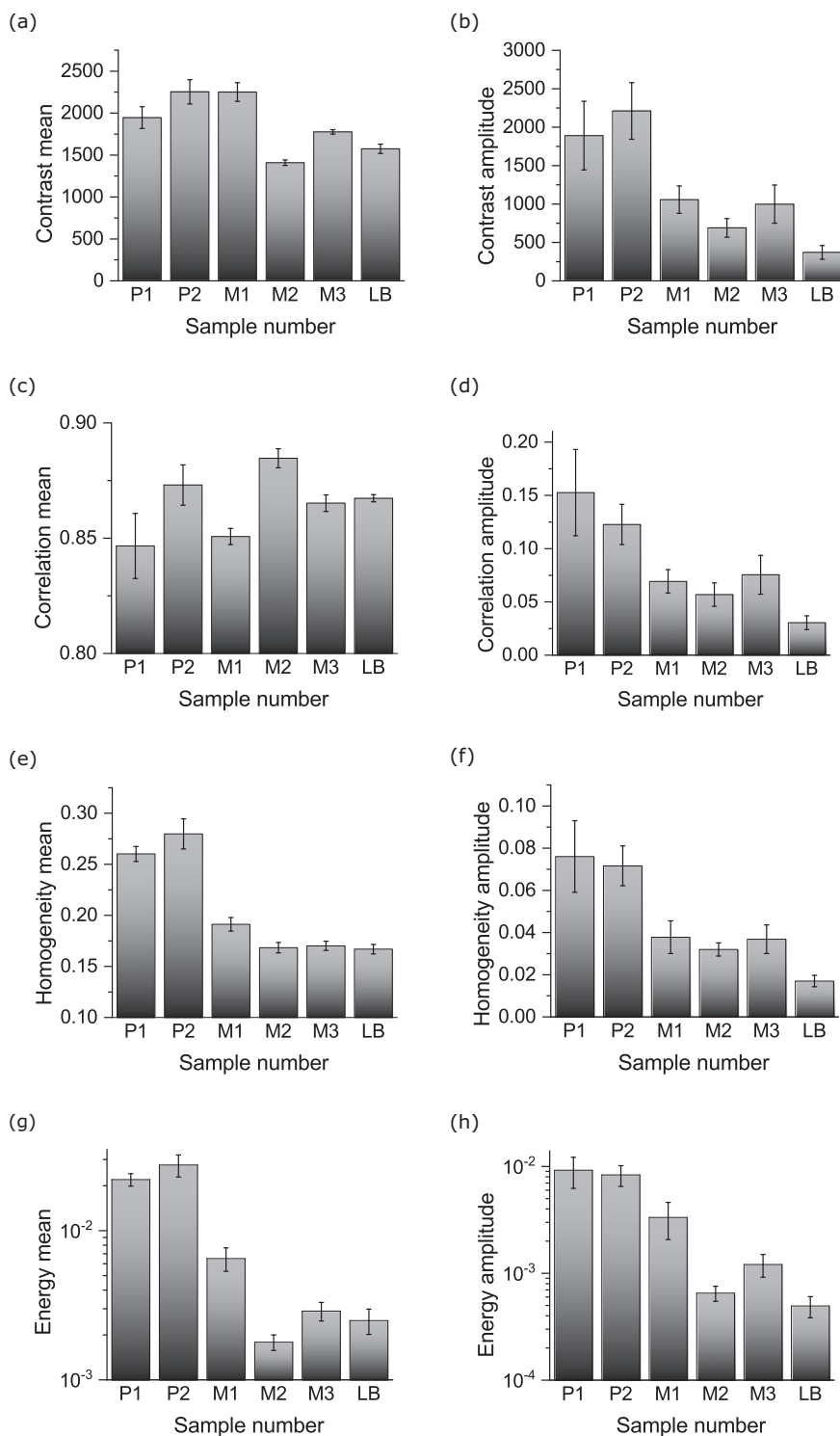


Fig. 8. Mean and amplitude values of the texture features (a–b) contrast, (c–d) correlation, (e–f) homogeneity and (g–h) energy averaged for 5 random complete object images of the sets P1, P2, M1, M2, M3 and LB, respectively. Energy values are in logarithmic scale.

main contrast comes from the etching of the lath or grain boundaries, which is similar to pearlite, but the lath interior is not smooth and has many lower gray level changes. This is probably due to topography, which stems from the highly inhomogeneous defect structure of martensite and therefore, local changes of the electrochemical potential in turn influence the etching response. The high amount of carbide precipitated inside the bainitic laths (Fig. 2) of the lower bainite is the reason for the comparatively high mean value in texture contrast of LB, because the carbides are very bright compared to the bainitic ferrite.

Considering the lower etch attack on the LB lath boundaries, their contribution to contrast is assumed to be low. The problem of bad segmentability of bainite has already been known to metallographers for a long time [19] and is mainly due to the low misorientation between the bainitic sheaves [13]. This is used here to our advantage to differentiate martensite from lower bainite. In this particular case, the amplitude value is introduced next to the mean value since the former also reflects the orientation characteristics of the particular constituents. The amplitude is also highest for the pearlite samples with

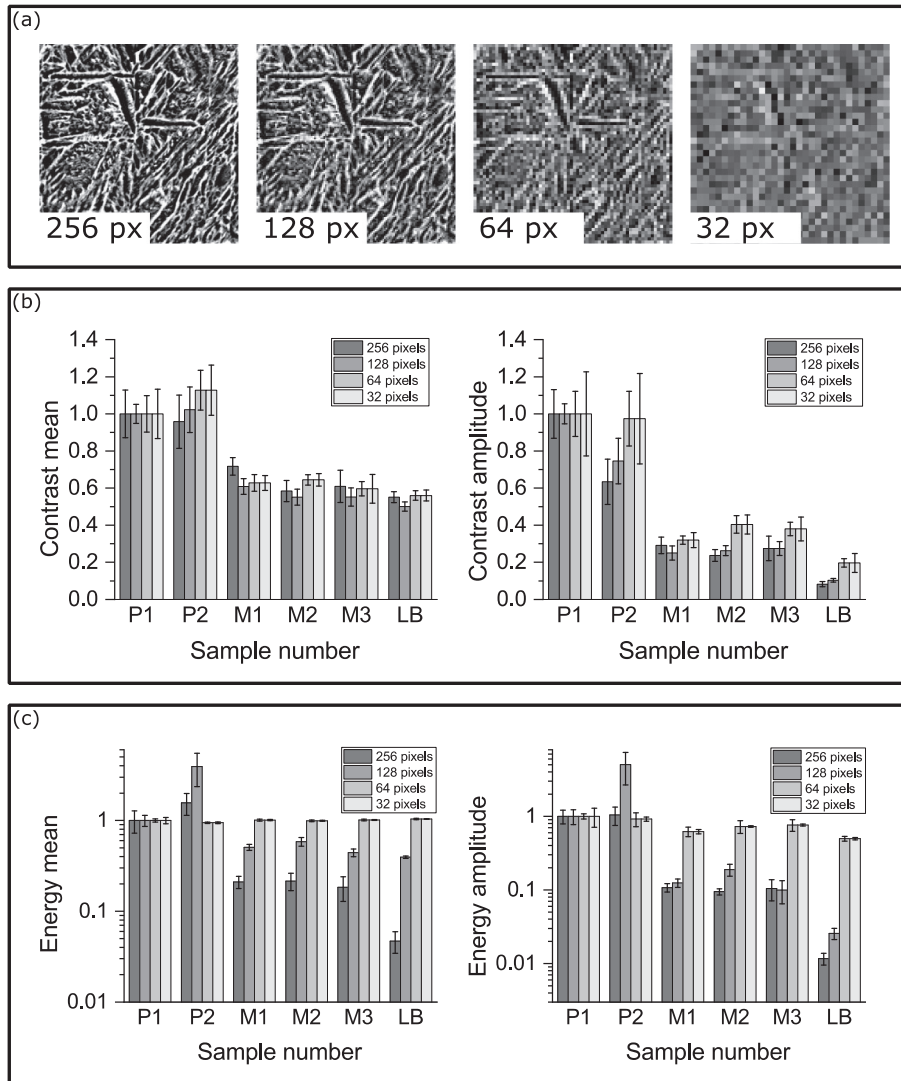


Fig. 9. Comparison of the two texture features, contrast and energy for different image resolutions (256, 128, 64 and 32 pixels). (a) A selected image of M1 with decreasing image resolution from left (256 pixels) to right (32 pixels). (b) Contrast and (c) energy mean and amplitude for P1, P2, M1, M2, M3 and LB for the different image resolutions. The mean and amplitude values are displayed as the average of all 5 sample images of the respective sample class. The values for the different classes have been normalized to the values of set P1 to allow comparability of values for the different resolutions. Energy values are in logarithmic scale.

minimum values near 0 when the lamellae are oriented to the image horizontal. The martensite follows second with its three sets, and finally with a significant difference, the lower bainite. Lower bainite has the lowest contrast amplitude value because the carbide precipitation and only scarcely visible lath boundaries give the sample a rather randomly oriented appearance for the currently used magnification.

Regarding the mean values, correlation does not allow a discrimination of the different constituents since the average values for pearlite, martensite and lower bainite are similar. Rather, correlation amplitude is effective in separating the steel constituents, as seen for the 256-pixel images. Nevertheless, considering homogeneity and energy, the highest separability is achieved for 128-pixel images (results not shown here). That implies that the influence of structure regularities on the texture correlation value is high when the structure scale is in the order of the image resolution, which was the case for most structures in images downsampled to 128 pixels.

The average values of texture homogeneity show that this texture feature is not necessarily expressible as the inverse of contrast [41], since in the example of the here investigated steel constituents, the texture contrast and homogeneity values are highest for pearlite, followed by martensite and bainite. This could be attributed to the high

homogeneity present inside the pearlite lamellae although the ferrite-cementite transitions produce very high local contrast.

Among the investigated constituents, the largest differences are shown in energy values (which describe texture uniformity). Obviously, texture uniformity is comparatively high for pearlite even if the lamellae are oriented 90° towards the pixel pairing direction. That is because the lamellae are several pixels thick in the original image resolution (256 pixels) and therefore, there are uniformly white or black areas comprised of many pixels. This is the reason why the mean energy of all rotational states of a certain image shows much higher values for P1 and P2 than for the other constituents. It also explains why the differences of the amplitude values between pearlite and the other phases becomes so low in the case of 64- and 32-pixel images: even larger uniform areas in the 256-pixel images are shrunk into one pixel when downsampled too much, and therefore the texture energy is reduced drastically. From the perspective of economy, imaging with low resolution has a positive impact on the acquisition time, data storage and computational cost of the analysis. This is especially important for industrial applications.

The amplitude value proves to be highly advantageous especially when changing the image acquisition settings such as contrast and

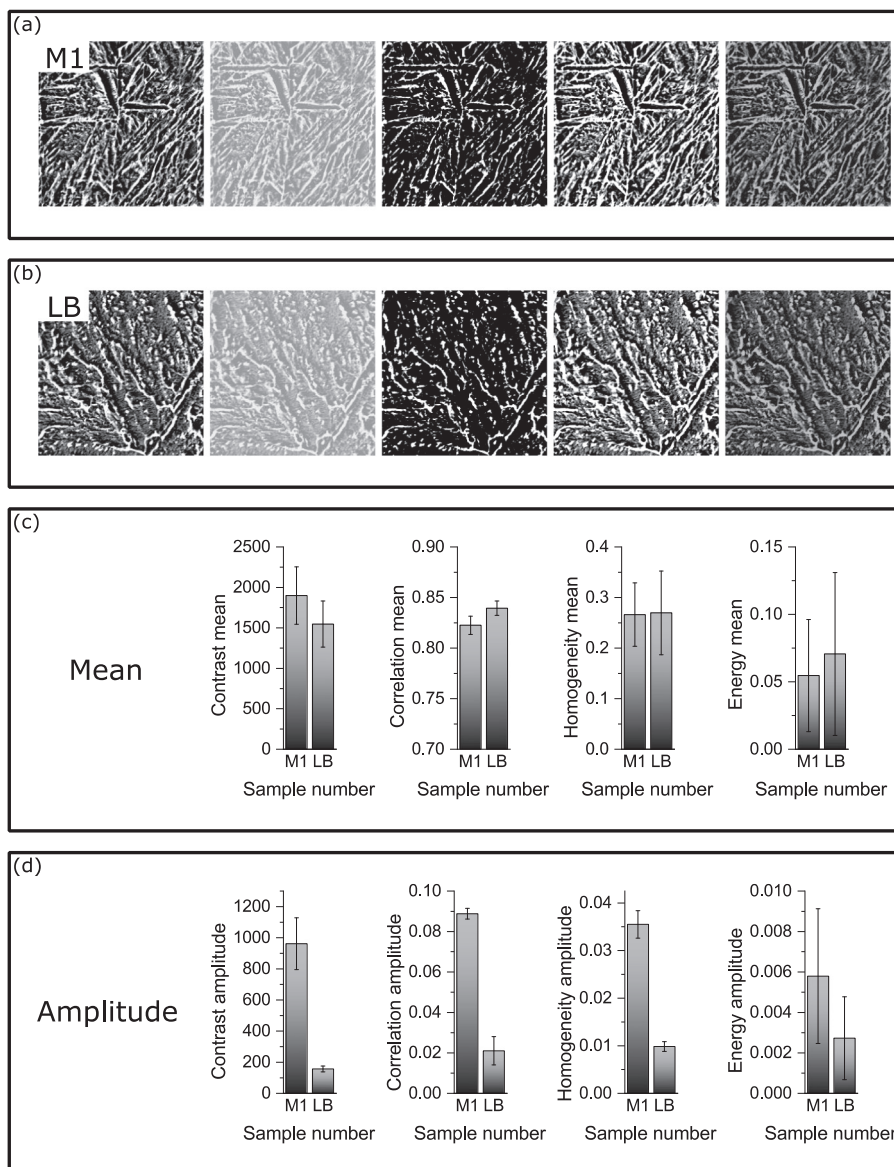


Fig. 10. Comparison of texture feature values of (a) M1 and (b) LB with different brightness and contrast settings. (c) Haralick mean and (d) amplitude values averaged for the images of M1 and LB.

brightness. In the test for M1 and LB, only by using mean, different contrast/brightness levels produce large overlaps of values. In contrast, the amplitude values of all texture features are clearly separated except for texture energy. The reason for that is the extreme settings which was implemented in one sample rendering the image quasi-binary. The generally small standard errors present for amplitude values of contrast, correlation and homogeneity are surprising since the contrast/brightness of the sample images in Fig. 10 were varied with the purpose of producing larger or smaller gray level transitions between the structural units in the microstructures and testing the limitation of the method. Indeed, the results suggest that orientation characteristics of the tested microstructures dominate. This is fortunate, as the various image pre-processing like histogram equalization always also introduces artifacts such as unwanted noise that could be confused with the microstructure. This has a big impact for the industry, which recently has started automated microstructure classification. Since these new classification techniques often require constant imaging conditions, a new data base must be built up first. Fortunately, there already exists a large amount of SEM image data produced by many metallographers with varying imaging conditions which can be used for characterization with the new

method.

The microstructure of complete objects was also analyzed to test the proposed method's usability for a realistic microstructure quantification [38]. The square-shaped sample images, which can be considered the ideal case, were all extracted from the interior of objects containing the carbon-rich constituents and therefore do not contain interfaces between ferrite and prior austenite grains or parts of the surrounding ferrite. Moreover, the analyzed grains vary in grain size and shape, so the proportion of (randomly oriented) grain boundaries relative to the internal structure is also different between the grains. That, and the fact that the object sizes deviate from the 256-pixel squares explain the comparatively larger scatter of the texture feature values, because smaller grains contain less substructure in total. This matches the findings of previous work, where it has been shown that for very small grains with little substructure, the differences in substructure morphology are less pronounced [20]. Subsequently, in the case of the complete objects, the difference between the amplitude values of the investigated second phases is much less pronounced than for the ideal case. Therefore, for latter one single metric is enough to discriminate the examined second phases, while for the real case of complete objects,

the use of a classifier will become necessary, especially, when the microstructures are finer than the ones investigated in this work. A SVM classifier has produced very good results in the case of morphological microstructure parameters by Gola et al. using [20]. Preliminary results have shown that, compared to using morphological parameters only, the inclusion of the Haralick parameters proposed here can increase the accuracy up to 15% to more than 90% total accuracy. A more detailed analysis will be published soon [42].

4.1. Other Steel Constituents

The carbon-rich steel constituents investigated in this work are very common ones that appear in low-carbon low-alloyed plate steel manufacturing. However, there are many more subclasses for each microstructure that were not considered in this work. For example, curved pearlite lamellae are often observed when the prior austenitic grains are big [43]. Analysis of those microstructures would reduce the amplitude values. However, in the presented work, also many of the complete objects show pearlite lamellae which are not straight but curved, and they still can be significantly separated from the other constituents. Additionally, there exist many so-called degenerate morphologies in steel, which are described by Zajac et al. [12]. One example is the degenerate bainite, which has a high proportion of retained austenite or transformed martensite on the lath boundaries. The method proposed in this work separates different constituents based on their micro-scale texture orientation but has limited sensitivity to the local sub-micron texture. One possibility for future work might be the combination of the proposed method with a local texture feature like the local binary pattern (LBP) histogram, as proposed by Guo et al. [35]. Future work should also incorporate upper bainite and self-tempered martensite into the proposed method. The former morphology has lath boundaries that appear like lower bainite only that the intra-lath carbide precipitation is missing, whereas the latter has a carbide precipitation that could be confused with the carbide precipitation in lower bainite.

5. Conclusion

By using the four texture features i.e. contrast, correlation, homogeneity and energy of the GLCM, it was shown that

- the proposed methodology showed significant results for a separation of different microstructures within one material class. This was demonstrated on the example of low-carbon low-alloy steels; the microstructures pearlite, lath martensite, and lower bainite can be successfully differentiated by using SEM secondary electron images after etching and stepwise image rotation. The separability is very good for selected representative and cropped areas, but also sufficient for real microstructural objects;
- the performance of the separability is good even for low image resolutions; although the magnitude of value differences is higher for high-resolution images, even with the lowest used resolution, the different microstructures could be separated;
- the amplitude value enables low-resolution images to be used, which has a marked effect on acquisition time, storage and computation cost;
- changing the brightness and contrast conditions show no measurable influence on the relative amplitude values except for quasi-binary images therefore, making it a robust tool for all metallographers/microscope users;
- by using image texture amplitude value, the separability of all constituents improves; for example, using the amplitude value for lower bainite makes it possible to significantly differentiate it from martensite; additionally, pearlite can be distinguished much clearer from the other constituents which is especially important when more ambiguous microstructures are investigated, like degenerated pearlite.

- the proposed methodology can be extended to other materials with constituents comprised of different substructures.

Data Availability

The raw data required to reproduce these findings are available for download together with this article.

Acknowledgements

The authors thank U. Pranav Nayak and Agustina Guitar for the fruitful discussion. The authors also gratefully acknowledge the financial support by the European Regional Development Fund (ERDF): C515110525.

We also thank the AG der Dillinger Hüttenwerke for providing the sample material.

Appendix A. Supplementary Data

Supplementary data to this article can be found online at <https://doi.org/10.1016/j.matchar.2018.08.009>.

References

- [1] 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>.
- [2] M. Aarnts, R. Rijkenberg, F. Twisk, Microstructural Quantification of Multi-phase Steels (Micro-quant), (2011), <https://doi.org/10.2777/83656> (Brussels).
- [3] 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>.
- [4] A.A. Gazder, F. Al-Harbi, H.T. Spanke, D.R.G. Mitchell, E.V. Pereloma, A correlative approach to segmenting phases and ferrite morphologies in transformation-induced plasticity steel using electron back-scattering diffraction and energy dispersive X-ray spectroscopy, *Ultramicroscopy* 147 (2014) 114–132, <https://doi.org/10.1016/j.ultramic.2014.07.005>.
- [5] A. Gourgues, H.M. Flower, T.C. Lindley, Electron backscattering diffraction study of acicular ferrite, bainite, and martensite steel microstructures, *Mater. Sci. Technol.* 16 (2000) 26–40, <https://doi.org/10.1179/026708300773002636>.
- [6] A.N.H. Zakerinia, A. Kermanpur, Color metallography; a suitable method for characterization of martensite and bainite in multiphase steels, *Int. J. Iron Steel Soc. Iran* 6 (2009) 14–18.
- [7] F. Hairer, A. Karellová, C. Kremaszky, E. Werner, T. Hebesberger, A. Pichler, *Etching Techniques for the Microstructural Characterization of Complex Phase Steels by Light Microscopy*, Int. Dr. Semin., Smolenice, 2008, pp. 50–54.
- [8] 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>.
- [9] A.R. Marder, A.O. Bencoter, Quantitative microanalysis of dual-phase steels, *Metallography* 15 (1982) 73–85, [https://doi.org/10.1016/0026-0800\(82\)90043-X](https://doi.org/10.1016/0026-0800(82)90043-X).
- [10] X. Liu, *Microstructural Characterisation of Pearlitic and Complex Phase Steels Using Image Analysis Methods*, The University of Birmingham, 2014.
- [11] C.K. Shui, W.T. Reynolds, G.J. Shiflet, H.I. Aaronson, A comparison of etchants for quantitative metallography of bainite and martensite microstructures in Fe-C-Mo alloys, *Metallography* 21 (1988) 91–102, [https://doi.org/10.1016/0026-0800\(88\)90039-0](https://doi.org/10.1016/0026-0800(88)90039-0).
- [12] 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, Trans Tech Publ*, 2005, pp. 387–394, <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/MSF.500-501.387>.
- [13] H.K.D.H. Bhadeshia, *Bainite in Steels*, second ed., IOM Communications Ltd, 2001, <https://doi.org/10.17863/CAM.7671>.
- [14] Y. Tomita, K. Okabayashi, Mechanical properties of 0.40 pct C-Ni-Cr-Mo high strength steel having a mixed structure of martensite and bainite, *Metall. Trans. A.* 16 (1985) 73–82, <https://doi.org/10.1007/BF02656714>.
- [15] D.H. Huang, G. Thomas, Structure and mechanical properties of tempered martensite and lower bainite in Fe-Ni-Mn-C steels, *Metall. Trans.* 2 (1971) 1587–1598, <https://doi.org/10.1007/BF02913881>.
- [16] E. Beraha, B. Shpigler, *Color Metallography*, American Society for Metals, Metals Park, Ohio, 1977.
- [17] D. Britz, A. Hegetschweiler, M. Roberts, F. Mücklich, Reproducible surface contrasting and orientation correlation of low-carbon steels by time-resolved beraha color etching, *Am. Soc. Test. Mater.* 5 (2016) 553–563, <https://doi.org/10.1520/MPC20160067>.
- [18] A. De, J. Speer, D. Matlock, *Color tint-etching for multiphase steels*, *Adv. Mater. Process.* 161 (2003) 27–31.
- [19] D. Britz, J. Webel, F. Mücklich, A.S. Schneider, Identifying and quantifying

- microstructures in low-alloyed steels. A correlative approach, *Thermomech. Process.* 3 (2017) 5–10.
- [20] 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>.
- [21] A. Fuchs, Application of Microstructural Texture Parameters to Diffusional and Displacive Transformation Products, The University of Birmingham, 2005, <https://doi.org/10.13140/RG.2.2.13094.11845>.
- [22] 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>.
- [23] 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>.
- [24] L. Shapiro, G. Stockman, *Computer Vision*, Prentice H, 2001.
- [25] P. Mather, B. Tso, *Classification Methods for Remotely Sensed Data*, CRC Press, London, 2016.
- [26] J.S. Weszka, C.R. Dyer, A. Rosenfeld, Comparative study of texture measures for terrain classification, *IEEE Trans. Syst. Man Cybern.* SMC-6 (1976) 269–285, <https://doi.org/10.1109/TSMC.1976.5408777>.
- [27] 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>.
- [28] L. Soh, C. Tsatsoulis, S. Member, Texture analysis of SAR sea ice imagery using gray level co-occurrence matrices texture analysis of SAR sea ice imagery using gray level co-occurrence matrices, *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.* 37 (1999) 780–795, <https://doi.org/10.1109/36.752194>.
- [29] R.M. Rangayyan, *Biomedical Image Analysis*, CRC Press, 2004, <https://doi.org/10.1201/9780203492543>.
- [30] J.P. Yun, S.H. Choi, J.W. Kim, S.W. Kim, Automatic detection of cracks in raw steel block using Gabor filter optimized by univariate dynamic encoding algorithm for searches (uDEAS), *NDT&E Int.* 42 (2009) 389–397, <https://doi.org/10.1016/j.ndteint.2009.01.007>.
- [31] K. Wiltschi, A. Pinz, T. Lindeberg, An automatic assessment scheme for steel quality inspection, *Mach. Vis. Appl.* 12 (2000) 113–128, <https://doi.org/10.1007/s001380050130>.
- [32] A.A. Ursani, K. Kpalma, J. Ronsin, Texture features based on Fourier transform and Gabor filters: an empirical comparison, *Proc. - Int. Conf. Mach. Vision, ICMV 2007*, 2007, pp. 67–72, <https://doi.org/10.1109/ICMV.2007.4469275>.
- [33] P. Brynolfsson, D. Nilsson, T. Torheim, T. Askklund, C.T. Karlsson, J. Trygg, T. Nyholm, A. Garpebring, Haralick texture features from apparent diffusion coefficient (ADC) MRI images depend on imaging and pre-processing parameters, *Sci. Rep.* 7 (2017) 1–11, <https://doi.org/10.1038/s41598-017-04151-4>.
- [34] 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/ICIP.2008.4712139>.
- [35] Z. Guo, L. Zhang, D. Zhang, Rotation invariant texture classification using LBP variance (LBPV) with global matching, *Pattern Recogn.* 43 (2010) 706–719, <https://doi.org/10.1016/j.patcog.2009.08.017>.
- [36] D. Britz, Y. Steimer, F. Mücklich, New ways in metallography: through controlled conditions to objective microstructure analysis of low-carbon steels by leper-etching, *Mater. Perform. Charact.* (2018) (submitted).
- [37] P.G. Ulyanov, D.Y. Usachov, A.V. Fedorov, A.S. Bondarenko, B.V. Senkovskiy, O.F. Vyvenko, S.V. Pushko, K.S. Balizh, A.A. Maltcev, K.I. Borygina, A.M. Dobrotvorskiy, V.K. Adamchuk, Microscopy of carbon steels: combined AFM and EBSD study, *Appl. Surf. Sci.* 267 (2013) 216–218, <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2012.10.172>.
- [38] D. Britz, J. Webel, J. Gola, F. Mücklich, A correlative approach to capture and quantify substructures by means of image registration, *Pract. Metallogr.* 54 (2017) 685–696, <https://doi.org/10.3139/147.110484>.
- [39] A. Ben-hur, J. Weston, A user's guide to support vector machines, in: O. Carugo, F. Eisenhaber (Eds.), *Data Min. Tech. Life Sci*, Humana Press, 2010, pp. 223–239, https://doi.org/10.1007/978-1-60327-241-4_13.
- [40] E.S. Gadelmawla, A.E. Eladawi, O.B. Abouelatta, I.M. Elewa, Application of computer vision for the prediction of cutting conditions in milling operations, *Proc. Inst. Mech. Eng. B J. Eng. Manuf.* 223 (2009) 791–800, <https://doi.org/10.1243/09544054JEM1268>.
- [41] D. Gadkari, *Image Quality Analysis Using GLCM*, University of Central Florida Orlando, 2004.
- [42] J. Gola, J. Webel, D. Britz, A. Guitar, T. Staudt, F. Mücklich, Automated Steel Classification by SVM Using a Combination of Morphological and Textural Parameters, (2018) (to be published).
- [43] T. Takahashi, D. Ponge, D. Raabe, Investigation of orientation gradients in pearlite in hypoeutectoid steel by use of orientation imaging microscopy, *Steel Res. Int.* 78 (2007), <https://doi.org/10.1002/srin.200705857>.

5.4 Publikation III

Objective microstructure classification by support vector machine (SVM) using a combination of morphological parameters and textural features for low carbon steels

Jessica Gola¹, Johannes Webel¹, Dominik Britz¹, Agustina Guitar¹, Thorsten Staudt², Marc Winter², Frank Mücklich¹

¹Chair of Functional Materials, Saarland University, Material Engineering Center Saarland, Campus D.3.3, 66123 Saarbrücken, Germany

²AG der Dillinger Hüttenwerke, Werkstrasse 1, 66763 Dillingen, Germany

Publiziert in: “**Computational Materials Science**“, Volume 160, April 2019, Pages 186-196

Verwendet in der Arbeit mit der Erlaubnis von Elsevier.

Online zugänglich unter: <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2019.01.006>

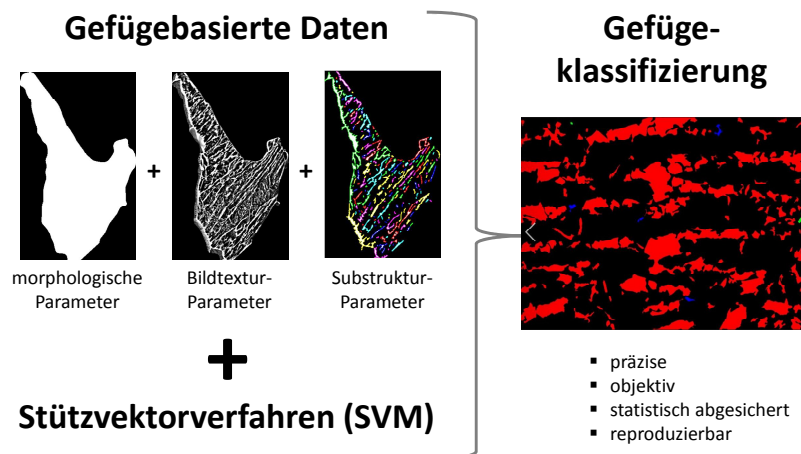


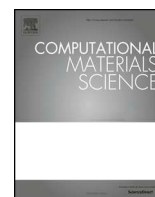
Abbildung 5.3: Graphical Abstract Publikation III.

Zu zitieren als:

J. Gola, J. Webel, D. Britz, A. Guitar, T. Staudt, M. Winter and F. Mücklich, “Objective microstructure classification by support vector machine (SVM) using a combination of morphological parameter and textural features for low carbon steels”, *Comput. Mater. Sci.*, vol. 160, pp. 186-196, 2019. (<https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2019.01.006>)

Autorenerklärung nach Brand et al.: [188]

Jessica Gola: Conceptualization, Methodology, Software, Validation, Formal Analysis, Investigation, Data Curation, Writing – Original Draft, Visualization; **Johannes Webel:** Methodology, Software, Formal Analysis; **Dominik Britz:** Conceptualization, Methodology, Writing – Review & Editing, Supervision, Project Administration; **Agustina Guitar:** Writing – Review & Editing, Supervision; **Thorsten Staudt:** Resources, Writing – Review & Editing, Supervision; **Marc Winter:** Resources, Writing – Review & Editing, Supervision; **Frank Mücklich:** Conceptualization, Resources, Supervision, Funding Acquisition



Objective microstructure classification by support vector machine (SVM) using a combination of morphological parameters and textural features for low carbon steels

Jessica Gola^a, Johannes Webel^a, Dominik Britz^a, Agustina Guitar^a, Thorsten Staudt^b, Marc Winter^b, Frank Mücklich^a

^a Saarland University, Chair of Functional Materials/ Material Engineering Center Saarland, Campus D3 3, 66123 Saarbrücken, Germany

^b AG der Dillinger Hüttenwerke, Werkstrasse 1, 66763 Dillingen, Germany

ARTICLE INFO

Keywords:

Microstructure classification
Data mining
Support vector machine (SVM)
Haralick image texture
Morphological parameter
SEM
LOM
Low-carbon low-alloy steel

ABSTRACT

The variety of modern steels is growing steadily. In order to meet the ever tighter tolerance ranges for the properties of these steels, it is important to both understand the manufacturing process as accurately as possible and to be able to correctly classify the microstructure. The microstructure acts as a link between the production and the properties, which acts as an information storage, which must be read out and understood in the best way to develop new steels. For this reason, it is of utmost importance to have an objective and reproducible microstructure classification available.

The present study demonstrates that using a support vector machine in combination with pixel-based and morphology-based parameters allows a reliable classification based on microstructural images. In order to determine the parameters correlative microscopy is used to collect a large variety of information about the different steel structures. The significance of the different parameter groups for the classification success and the correlation of the parameters with each other are investigated. The minimum number of parameters required for a reliable classification is determined by evolutionary feature selection.

1. Introduction

The microstructure of steels is determined by the manufacturing process. Continuously evolving process control led to the development of new steels with high quality and tailored properties. The microstructure provides the link between the process and the properties. Casting, rolling, cooling and heat treatment conditions are saved in this multiscale storage. During microstructure classification the information of this memory has to be read out and then linked to the properties and the manufacturing process. Based on this knowledge, a 'microstructure-based' material development becomes possible, which can be implemented by simulating the microstructure-property relationship [1]. Traditionally, microstructures are classified after etching using light-optical microscope (LOM) images by comparing them with other images. Some studies have been dealing with steel classification systems based on LOM images. According to Smirnow, the most advanced classification systems were those of the Bainite Committee of the Japanese Iron and Steel Institute (ISIJ) and the International Institute of

Welding (IIW) [2]. In both systems very detailed structures were described, which were often difficult to find in light microscopic images, especially when the preparation differed. The microstructure classification used in the IIW scheme was further developed by Thewlis in 2004 who added new terminologies to the existing table. The new terminologies included descriptions of both the main structures and the subcategories whereas the classification scheme was based on flow-charts containing guidelines for identifying the main structures [3]. On this basis microstructures were investigated in light microscopy in order to detect and precisely describe their structural constituents [2]. These LOM image-based approaches are becoming cumbersome due to the constantly growing variety of modern steels with finer structures and a large number of structural constituents. The susceptibility to errors is high and the reproducibility of the subjective evaluation based on LOM images is not guaranteed, which leads to problems, especially in quality control.

For a better comparability of different LOM images, quantitative values such as the phase fraction in two-phase microstructures are

E-mail addresses: jessica.gola@uni-saarland.de (J. Gola), j.webel@mx.uni-saarland.de (J. Webel), d.britz@mx.uni-saarland.de (D. Britz), a.guitar@mx.uni-saarland.de (A. Guitar), Thorsten.Staudt@dillinger.biz (T. Staudt), marc.Winter@dillinger.biz (M. Winter), muecke@matsci.uni-sb.de (F. Mücklich).

<https://doi.org/10.1016/j.commsci.2019.01.006>

Received 16 October 2018; Received in revised form 4 January 2019; Accepted 5 January 2019
0927-0256/ © 2019 Elsevier B.V. All rights reserved.

determined based on the binary images using image processing programs in modern approaches. This makes quantitative structural analysis possible, which supports an assessment on the basis of numerical values. Morphological parameters such as the aspect ratio, size distribution or volume fraction of different phases can help to quantitatively describe differences in microstructures. For example, Ramazani et al. used the aspect ratio and height of martensitic objects in a dual-phase steel to characterize the variations in microstructures using different annealing temperatures for application to artificial representative volume elements [4]. In the study conducted by Abid et al. a simulation-based approach was used to show that elongated martensite second-phase objects lead to a better overall performance compared to equiaxed martensite objects and that interconnected martensite phase increase both strength and ductility. Moreover, an increase in the volume fraction of equiaxed martensite objects contained in microstructures of elongated particles showed a simultaneous reduction in strength and ductility [5].

Owing to the low resolution, in addition to light microscopic investigations high-resolution microscopy methods such as the scanning electron microscope (SEM) are used for more precise steel characterization. In addition to the increased resolution of the microscopes the misorientation information can be obtained by using the electron backscatter diffraction (EBSD) technique, which has proven to be a powerful tool in steel microstructure characterization. This can be attributed to the different forming mechanisms displayed by the steel transformation products (martensite, pearlite and bainite), leading to variations in their displacement densities [6]. This allows phase separation through special orientation relationships, as was performed by Gourges et al. and Zajac et al. to separate martensite and different forms of bainite [7,8]. Nevertheless, EBSD examinations are time consuming and costly so that the microstructure classification approaches for industrial application concentrate on microscope images. Furthermore, EBSD alone is not meaningful enough to allow a complete microstructure classification compared to correlative approaches such as shown by Britz et al. [9]. Above all, correlative approaches offer the possibility of using several sources to generate information. A way to combine LOM images and SEM images in order to separate the microstructure constituents is shown by Britz et al. for two-phase steels [10]. Here a LOM image is registered together with an SEM image using the SIFT and bUnwarpJ algorithm in the Fiji program so that both images show exactly the same sample location. By employing an adapted etching technique, the ferritic matrix could be separated from the carbon-rich phase in the light microscope image by threshold segmentation. The second-phase objects detected in this way can be isolated using MATLAB® and analyzed in a subsequent step. For such methods, it is important to have adapted etching concepts for the materials that enable a separation of the structural constituents. Besides a structure etchant such as Nital [11] a color etchant such as Beraha [12] can be useful, especially for two-phase steel structures where the differences in contrast of the ferritic matrix compared to the carbon-rich phase can be used to separate the phases. Etching can be used to a great advantage for correlative approaches as it shows a suitable contrast both in LOM and SEM. Even if etching alone cannot accurately classify the microstructural constituents of steel, it can help to separate constituents from each other and thus support other methods. For instance, adequate etching [13] and the high-resolution imaging-based analysis in SEM can be used to detect the image texture. These methods are already used in steel characterization and show good results [14–17]. The image texture is defined as “the spatial arrangement of colors or intensities in an image” [18]. These image texture-based analysis methods have already been successfully applied not only to steels, but also in the field of satellite image classification or biomedicine [19–23]. For steels, Gabor filters have already been used to detect defective structures [24] or by using a multidimensional Gabor filter quantitative values have been derived from LOM images in order to show the characteristic morphology of carbide distributions in steel [25]. Fourier transforms have proven to be

very effective for regular structural segmentation such as pearlite [26], but fail in case of noisy images [27] and therefore application to SEM images is not possible. For texture parameters, on the basis of the so-called Gray Level Co-occurrence Matrices (GLCM), image noise has little influence on the performance of texture analysis [28]. Originally, these parameters were developed by Haralick et al. [21]. These texture features are calculated based on pixel neighborhoods in vertical, horizontal and diagonal direction or as a mean value of all directions [21]. Dutta et al. could show for fully martensitic steel that a variation of the tempering parameters has a different effect on the GLCM characteristics of the image texture of SEM micrographs [16]. Generally, the use of GLCM features on etched steel microstructures in SEM images is very promising, as the grayscale distribution for the different microstructure constituents is different. Of course, such parameters are very dependent on the structural orientation in the images, which can be very different for steels regardless of the phase due to the crystallographic orientation. For this reason, rotation-invariant texture descriptors were developed, such as the histogram of the local binary pattern (LBP) introduced by Ojala et al. [29]. These can measure the local texture and contrast, but higher-level information of the structure is not accessible. To include global texture orientation in a classification scheme, Guo et al. combined the LBP parameters with a matching of the global structure. The oriented and shifted LBP histograms could then be classified according to their differences. However, the method will be problematic for textures that do not have a clear orientation, as is the case with many of the steel microstructures. In the new approach by Webel et al. a distinction between different steel microstructures was presented based on an improved Haralick image texture feature method. The method calculates a rotation-invariant value of the original Haralick image texture features using a new approach that requires image rotation of squared images. The method was used for the characterization of steels to distinguish the typical constituents martensite, pearlite and bainite [31]. These textural features, especially the amplitude values, were independent of image resolution and microstructure orientation and showed good results in separating the microstructural constituents of steel. Upon further investigation of isolated microstructural objects, the distinction was still possible, but not as significant as on the squared images. For this reason it can be concluded that a single parameter is not sufficient for a complete microstructure classification. However, these parameters have a high potential for microstructure classification in combination with computer science classification algorithms.

Methods in computer science offer new ways for objective microstructure classification based on microscopic images. In these approaches, different algorithms and various microstructural parameters are used to build a classification model. One of the first approaches using machine learning in the field of cast iron classification was presented by Velichko et al. The study used data mining methods to build a model based on the morphological data of the different graphite formations in cast iron to classify these classes [32]. Data mining methods are based on algorithms that search for patterns and relationships in big data sets to generate new knowledge [33]. This term covers data analysis as well as data preparation and modeling. The new knowledge is summarized in a model, which can then be applied to new data. The models are evaluated using standard evaluation and statistical procedures. In the study, Velichko et al. used a support vector machine (SVM) as a classifier. A SVM allows creating a model with pre-classified, so called labeled data that can be applied to new/unlabeled data. The model for graphite classes in cast iron could correctly classify most of the classes with 95% accuracy. A similar approach was used by Liu et al. to classify various steel microstructures such as two-phase, fully pearlite and mixed microstructures [26]. In their study they used a k-nearest neighbour (kNN) classifier in combination with pixel-based parameters on the basis of the Gray Level Co-occurrence Matrix (GLCM). The aim was to distinguish between bainite (upper bainite and lower bainite), martensite and ferrite phases. For two-phase steels the match between the phase fractions of different constituents compared

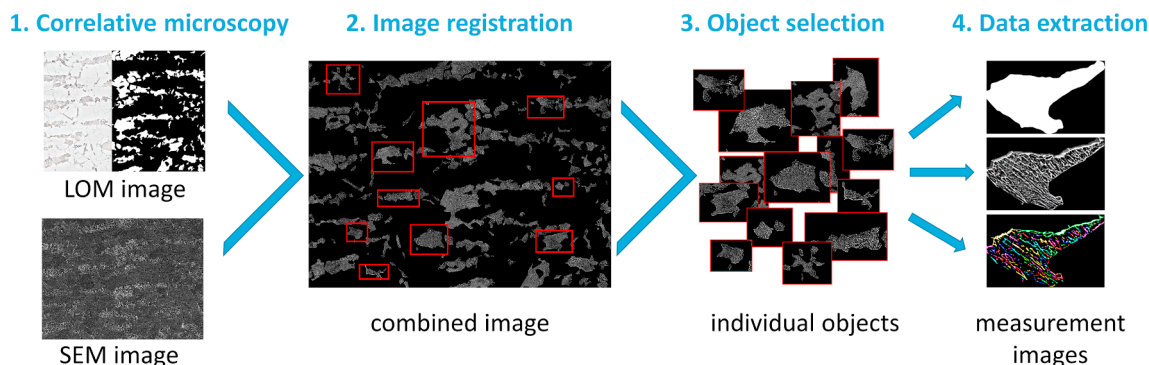


Fig. 1. Steps of the different methods used to obtain the data for the data mining classification.

to a manual evaluation was successful. The pearlite structures could not be classified based on the developed workflow, but in a first approach applied to artificial structures and using Fourier transform analysis accuracies of 93.8% could be achieved.

DeCost classified seven different materials (ductile cast iron, gray cast iron, malleable iron, annealed twin billets, brass hypereutectoid steel and a superalloy) using a SVM model in combination with visual features. A separate model was created for each image class and the classifier system achieved a cross-validation accuracy of 83% [34].

During further investigation, a microstructure dataset focusing on complex, hierarchical structures found in single ultra-high carbon steel under a range of heat treatments was investigated by DeCost et al. using supervised and unsupervised machine learning techniques, insight into microstructural trends and their relationship with processing conditions could be gained. Using keypoint-based and convolutional neural network representations, classification comparisons of microstructures were done according to their primary microconstituent and to the annealing conditions that generated them. Furthermore, they showed graphical methods for exploring microstructure and processing datasets in order to understand and interpret high-dimensional microstructure representations [17]. In our previous study, a SVM-based approach was utilized to classify different steel microstructures using morphological parameters from LOM and SEM images [14]. With 10 parameters for the morphology of the different classes – martensite, pearlite and bainite – a total classification accuracy of 87.15% was achieved. In a further study, substructure parameters were calculated by the mean and standard deviation of the morphologic parameters of the internal structure taken from the segmented SEM images. These parameters showed a high classification potential with a total accuracy of 88.33% based on 10 parameters.

Deep learning methods show that besides the data mining methods new approaches to an automatic and objective classification of microstructures are possible. For example, Masci et al. showed that convolutional neural networks (CNNs) can be used to detect defects in steel [35]. Chowdhury et al. combined deep learning and data mining methods. In their study, pre-trained neuronal networks were used to extract features for dendrites from microstructure images of different Sn-Ag-Cu compositions. These features were used to train an SVM model. A classification accuracy of 97% could be achieved for the presence of dendrites [36]. A. M. Azimi et al. achieved a classification accuracy of 65% in the same approach for the material steel for the 4 classes martensite, tempered martensite, bainite and pearlite [37]. In the same study by A.M. Azimi et al. a new approach show that the use of CNNs to perform both segmentation and objective and reproducible classification of microstructures leads to good results. The networks can reach a high classification accuracy of 96% for the 4 classes martensite, tempered martensite, bainite and pearlite [37]. Although deep learning methods could be used in microstructure classification, the disadvantage is that access to the features on which the models are based is no longer possible. Hence, the material-based background does no

longer show in the results in contrast to the data mining methods, and a link between the parameters and the classification result can no longer be made.

The aim of this work is to prove that data mining models built of different parameter groups from different recording sources are of great importance for microstructure classification of two-phase steels with a ferritic matrix. It is shown that both the morphology of the phases and the texture of the substructure, which can be described by morphology and pixel-based parameters, are important for high classification accuracy. Furthermore, the use of evolutionary feature selection methods for the selection of significant parameters in combination with a correlation analysis is evaluated. The classification results are compared, discussed and the significant parameters are linked to the microstructures.

2. Experimental

The first step to create a data mining model is to build a solid database. Fig. 1 schematically shows the data acquisition process. First, after specific sample preparation, light microscopic and scanning electron microscopic images have to be taken. The next step is to convert the light microscope image into a binary image and combine it with the electron microscope image. In the combined image, individual objects can be detected from which the data for the database can be measured.

2.1. Material and class definition

The image databases by Gola et al. [14] and J. Webel et al. [31] were used for the investigations. The steels showed a two-phase microstructure with a well-defined second phase of martensite, pearlite or bainite structure. The carbon content of the steels was about 0.06 wt%. The pre-classification of the second phase, which is necessary in supervised learning for the training of classification models, was carried out by experts. In this study, all structures that could not be clearly assigned to the martensite or pearlite class were classified in the bainite class. Thus, the class has a large structural diversity of bainitic structures which are not differentiated. In total, the data used for the classification investigations covers 11091 complete second-phase objects from different samples. 4108 of these objects belonged to the martensite class, 5691 to the bainite and 1292 to the pearlite class. The dataset consisting of the three predefined microstructure classes forms the ‘ground truth’ for the classification.

2.2. Sample preparation

The samples were ground using 400–2500 grid SiC papers and then polished with 9, 6, 3 and finally, 1 μm diamond polishing. Furthermore, a 120 s OP-S polish was used to obtain smooth surfaces for subsequent etching. Etching was done using a 3% aqueous potassium metabisulfite

etchant that has shown excellent results for steel characterization and classification before [13]. Short etching times using a Beraha etchant lead to a good contrasting of the second-phase areas while the boundaries are not visible. The metallographic preparation was performed by different users so that varying preparation techniques and the associated small variations can be found in the microscopy images [14,31].

2.3. Microscopy

To extract the parameters for the classification from the microscope images, both LOM and SEM images of the microstructures must be taken. The morphological parameters of the second phase were read from the light microscopic images. For this purpose a Leica DM6000M light microscope was used. Since the LOM images and SEM images have to be taken at the same location in order to be able to use the correlative data for the classification, areas of $300\ \mu\text{m} \times 300\ \mu\text{m}$ were marked with hardness indentations and images were taken of these areas. The SEM images were recorded with 1000x magnification using a Zeiss Merlin FEG-SEM with secondary electron contrast and image sizes of 4096×3072 pixels resolution. In order to cover the same area as in the light microscope, 24 images were stitched using the Zeiss software. The SEM images were taken using an Everhart-Thornley detector and an acceleration voltage of 5 kV, a probe current of 300 pA and a working distance of 5 mm.

2.4. Segmentation and registration of the microscopy images

In order to measure the morphology of the second-phase objects the LOM images had to be converted into binary images. This was done using the Zeiss Axiovision program. The second-phase objects were separated from the matrix by threshold segmentation using standard filters such as shading correction and denoising. Errors and artifacts in the segmented LOM images were detected and removed by deleting all objects that did not have any substructure after combination the LOM image with the SEM image.

For the registration of the segmented LOM image together with the corresponding SEM image the procedure presented by Britz et al. was used [10]. First, the images were registered using the SIFT and bUn-warpJ algorithm by Fiji. After registration the LOM and SEM images show exactly the same image section and the same number of pixels. To these images the MATLAB® code by Britz et al. could be applied for extraction of individual objects from the images [10]. In order to be able to measure the parameters the segmented LOM image, the combined LOM and SEM image and the segmented combined LOM and SEM image are needed. For this reason, the MATLAB® program was extended so that threshold segmentation can be applied to the combined images. The result was a binary image of the substructure of each second-phase object. In Fig. 2 the three measurement images of an individual object are shown as an example.

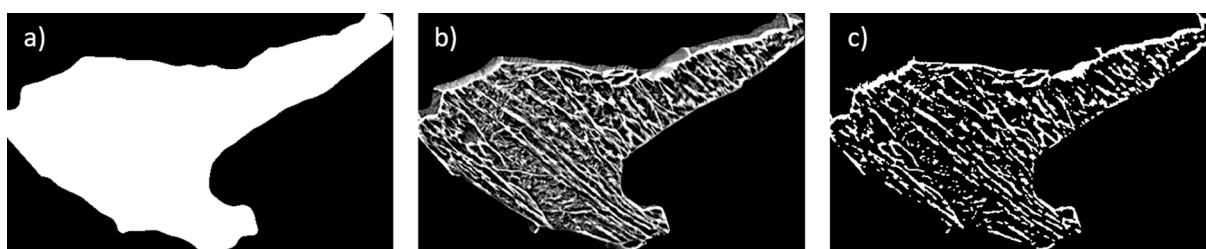


Fig. 2. Example of the three measurement images of a single object needed for generation of the parameter database, (a) segmented LOM image for acquisition of morphological parameters, (b) combined LOM and SEM image for calculation of pixel-based textural features and (c) segmented combined LOM and SEM image for acquisition of morphological substructure parameters.

2.5. Parameter measurement

The classification data consists of three different parameter groups obtained from the three images. For the purpose of measuring the parameters a MATLAB® program was written in order to create the data automatically. First, the morphological parameters from the binarized LOM images presented by Gola et al. were gauged [13]. For each complete object the morphological parameters describing the morphological appearance of the second-phase objects were measured using the MATLAB® software with regionprops function. Most of the 23 morphological parameters are already implemented in the MATLAB® software and only 5 additional parameters had to be defined and calculated separately (Table 1).

Subsequently, the textural features, consisting of amplitudes and mean values for the Haralick features, energy, homogeneity, and correlation presented by Weibel. et al. were calculated using the added LOM and SEM images [31]. In total, 8 features were obtained for each individual complete object. Finally, based on the combined segmented images the morphological substructure parameters proposed by Gola et al. were measured for every second-phase object [14]. For the substructure parameters, the average value and the standard deviation of the logarithmic distribution for each of the morphological parameters, except the substructure area density, of all sub-objects of a single object were measured. These 44 parameters were used to describe the substructure of a whole object [14].

The three different parameter groups with their names, description and the number of calculated parameters are shown in Table 2.

In sum, for each complete object 75 parameters were obtained (8 textural features, 23 morphological parameters for the objects and 44 for the substructure). These parameters were saved in an excel sheet and taken as input for the data mining model.

2.6. Data preprocessing and data split

Data preprocessing is an important task in view of the classification result, especially if the parameter values have very different value ranges and distributions [39]. The dataset used for the classification showed a large distribution of value ranges so that the parameters needed to be normalized using a standardization method. This standardization method converts each of the feature vectors to have a zero mean (μ) and a unit standard deviation (σ). Furthermore, the morphological parameters of the objects and the substructure parameters were log transformed before normalization was applied. Primary results by Gola et al. [14] have proven that the data mining model can handle log transformed values for the morphological parameters better than the normal values.

Moreover, for a successful classification the data must be divided into two datasets before model training: one to train the model and one to test the final model's generalization capabilities. It is imperative to separate the test and training data before modeling so that the model can be validated against independent test data that was not used during

Table 1
Additional morphological parameters that were calculated [32,38].

Name	Description
Convexity	Squared ratio between the object's convex perimeter and its perimeter
Circularity	The ratio between the diameter of the circle with the same area as the object area and the object's maximum feret diameter
Roundness	The ratio between the area filled and the area of a circle with a maximum feret diameter
Sphericity	The ratio between the object area and the area of the circle with the same perimeter as the object's perimeter
Area density of substructure	The ratio between the total area of the substructure particles deduced from the SEM images and the area of the corresponding grain as determined in the optical micrographs

the training process. For this reason, a training dataset and a test dataset were created from the whole data. In the first step the data, which covered 11091 complete objects, was shuffled to make sure that objects of each sample were in both datasets. The advantage of a shuffled data split is that the whole variety of structure appearances in one class from different samples can be maintained. The training data was used to create a model and test it during the training process. For all classes, the same number of objects was used for the training in order to have a balanced dataset. Since the pearlite class contains only 1292 objects, 1100 objects were used for each class. Training a model with a dataset showing an uneven distribution of classes can lead to a shift in importance for the class containing more data. The independent test data, which covers 7791 complete objects, was finally used to test the finished model for its generalizability on independent data.

2.7. Support vector machine (SVM)

A libSVM is a method that allows for separating labeled data and creating a model for a classification task. This method was used because it enables a multi-class classification [43]. The quality of the classification by SVM is defined by the parameters setting of C and γ . The γ parameter defines the influence of a single training example. Low values mean “wide” and high values mean “close”. The C parameter replaces the misclassification of training examples with the simplicity of the decision surface. Low C smoothens the decision surface, while high C aims to correctly classify all training examples [43].

2.8. Feature selection

The number of parameters was reduced by feature selection methods in order to decrease the complexity of the model and thus its tendency to over-fit the data. These methods allow reducing the dimension of the model by selecting a subset of the original dataset, maintaining the classification accuracy [40,41].

Correlating parameters do not provide additional information and reduce the generalizability of the model. Accordingly, the parameters were examined for correlation and their importance. A correlation matrix was created for each of the three parameter groups and the parameters showing a correlation of more than 0.95 were removed using a filter. Subsequently, the dataset with the uncorrelated attributes was examined using evolutionary feature selection. Evolutionary feature selection selects the most relevant attributes of the given dataset based on a genetic algorithm. A genetic algorithm is a feature selection

method that mimics the process of natural evolution. This method is applied with a view to finding useful solutions for optimization and search problems. Genetic algorithms belong to the larger class of evolutionary algorithms, which use techniques inspired by natural evolution, such as inheritance, mutation, selection, and crossover. In genetic algorithms for feature selection, 'mutation' means switching the features on and off and 'crossover' means interchanging the features used [42].

During evolutionary feature selection a libSVM was used as a classifier to test the significance of the different classification parameters. The advantage of using a feature selection method, which uses the selected classification method, is that the significant parameters are selected explicitly for the libSVM model based on the performance. Thus, parameters that are important for model building can be distinguished from unimportant ones directly by looking at the result. In a loop, different C and γ parameters as well as the parameter combination of the features chosen by the genetic algorithm were varied. Those parameters that are not decisive for modeling were removed and only important parameters were kept. This feature selection method was chosen to find out which parameters from the different groups are still present in the final data set after feature selection and if all groups show the same importance for a classification.

After the evolutionary feature selection, the remaining parameters were examined using different filters and weighting methods and a feature ranking was created based on their importance.

2.9. Classification process using support vector machine

For the classification, the classification workflow of Rapid Miner by Rapid-I GmbH was employed, which was developed by Gola et al. [14]. For the data preprocessing and the settings the preliminary results by Gola et al. were used.

During the process, a SVM was applied as a classifier that allows multi-class classification. The training data was now fed to define the best combination of C and γ in a grid search. For the training of the SVM model, a 5-fold cross-validation (x-validation) and a radial bias function kernel were used. The x-validation divides the data into 5 parts out of which 4 were selected for training and one for validation. The SVM successively created a model for all 4 training datasets and predicted the validation performance for a given set of C and γ combinations. The result of the training process is the x-validation performance, which is the average of validation data performance for the best parameter combination. The final model was trained on the best parameter

Table 2
Three parameter groups that are used to build the data mining model.

Group	Name of the group	Description/Literature reference	Number of parameters
Group 1	Morphological parameter	Morphological parameters of the objects in the segmented LOM image [14]	23
Group 2	Textural features	Amplitude value and mean value of different Haralick features in the combined LOM and SEM image [31]	8
Group 3	Substructure parameter	Mean and standard deviation of the morphological parameters of the substructure in the segmented combined LOM and SEM image [14]	44

combination and all the training data. Next, the final model was tested against all the training data in order to get the training performance. Finally, the performance of the final model was tested for generalization against the independent test data. If the results of the model's x-validation, test and training data are close together, the model can classify independent data as reliably as the known data and thus perform a reliable classification [44]. The classification results were summarized in a confusion matrix. The major diagonal of the matrix shows the correctly classified objects and the side diagonals show the misclassified objects. The overall accuracy was calculated by dividing the sum of all entries of the major diagonal by the absolute number of objects. The performance metrics used, such as accuracy, precision, recall and kappa, are explained in [45].

3. Results

3.1. Significance of the different parameter groups

This section reports the results from the data mining process using textural features and morphological parameters for the objects and the substructure. The success of the classification is validated based on x-validation performance, training performance and test performance as well as kappa values. The data used for the classification investigations covers 11091 complete objects. Out of the 11091 complete objects, each of the three classes consisting of 1100 objects was used for training and the rest of the data was used for testing. The test data, which was only used at the end to test the final models, covered 3008 objects in the case of martensite, 4591 objects in the case of bainite and 192 objects in the case of pearlite. From this data, different datasets were used for the experiments, as summarized in Table 3.

Dataset 1 contains only the textural features whereas dataset 2 is a combined set including morphological parameters. Dataset 2 had 75 parameters in total. For dataset 3, the correlated parameters of each parameter group with a correlation of more than 95% have been removed from dataset 2. A dimensional reduction helps to reduce irrelevant information, which may otherwise distort the model. Correlated parameters give the same information to the model and are thus not helpful for distinguishing different classes. The group of textural features showed a correlation of less than 95%. The highest correlation was 92.4% between amplitude value for contrast and amplitude value for correlation. For the morphological parameters of the objects, 9 independent parameters remain. For the morphological substructure parameters, 12 non-correlated parameters remain. Dataset 4 was created by reducing the number of parameters in dataset 3 using evolutionary feature selection. Feature selection is a technique for reducing the dimension of the model by finding a subset of the original parameters that best represents the dataset [40,41]. The best performance was reached using 16 parameters, consisting of 5 textural features, 5 morphological object parameters and 6 morphological substructure parameters. The weighted parameters after evolutionary feature selection are shown in Table 4.

According to the weighting of the 16 most important parameters after feature selection, the substructure parameter mean of the convex area is the most relevant parameter with a value of 1, followed by the mean of mittferet and the standard derivation of diameter maximal inscribed circle. The axial ratio and convexity parameters with values close to 0 have less relevance.

Table 3
Summary of the different datasets that were used to train and test the data mining models.

Name	Dataset 1	Dataset 2	Dataset 3	Dataset 4
Total number of parameters	8	75	29	16
Number of parameters: textural/morphological/morph. substructure	8/0/0	8/23/44	8/9/12	5/5/6
Feature selection	–	–	Remove correlated features	Evolutionary feature selection

Table 4
Textural features and morphological parameters after removing correlated parameters, feature selection and parameter ranking.

Parameter	Weight
Mean of convex area	1 ↓ 0
Mean of mittferet	
Std. derivation of diameter max. inscribed circle	
Mean of roundness	
Amplitude value for correlation	
Mean of area convex / area filled	
Amplitude value for contrast	
Mean of area to total area	
Mean value for homogeneity	
Amplitude value for energy	
Area to total area	
Mean value for energy	
Ellipse minor	
Perimeter	
Convexity	
Axial ratio	

3.2. Classification using textural features

First, the 8 textural features (dataset 1) are tested in the data mining process. As shown in Table 2, the training data yielded an x-validation performance of $87.24\% \pm 2.25\%$ and a training performance of 92.52%. The total accuracy of the test data was 85.77%. The values of test and training performance showed a gap of 7%, which means that the model can perform a reproducible classification of unknown test data, but not as reliably as with the known training data. The performance measurement kappa showed good results with values larger than 0.7 (Table 5).

The classification result of the test data yielded an accuracy of 85.77% (Table 6). For the martensite class, the accuracy rate is 87.77% and the corresponding precision is 82.97%. The accuracy rate for the pearlite class is 92.71% with a precision of 38.36%, and for the bainite class it is 84.16% and 93.22% respectively. The low precision value is due to the fact that the pearlite group only includes 192 test objects. If objects of other classes are wrongly classified as pearlite, the precision value decreases.

For this model, the γ parameter showed a value of 0.014. The C parameter was 460 000.

3.3. Classification using textural features in combination with morphological parameters

Datasets 2 to 4 were tested in the data mining process in order to compare the classification results for the combination of pixel-based and morphology-based parameters. For the morphological parameters of objects, the classification test accuracy reached by Gola et al. was 87.15%, whereas it was 88.33% for the substructure parameters [14]. As shown in Table 7, dataset 2 yielded an x-validation performance of $98.03\% \pm 1.01\%$, a training performance of 100% and a total test data accuracy of 96.83% for the given dataset for the 3 classes. The values

Table 5

Classification results for the three performance measurements of x-validation, test and training data and the kappa values for the textural features data.

Dataset	Accuracy x-validation [%]	<i>kappa</i> x-validation	Accuracy training data [%]	Accuracy test data [%]	<i>kappa</i> test data	<i>C value</i> / γ value
Dataset 1	87.24 \pm 2.25	0.809 \pm 0.034	92.52	85.77	0.703	460 000/ 0.014

Table 6

Confusion matrix for the classification of the textural parameters for complete objects for the three classes pearlite, martensite and bainite in Rapid Miner.

Accuracy: 85.77%				
\downarrow Prediction/true \rightarrow	Martensite	Pearlite	Bainite	Class precision
Martensite	2640	5	190	82.97%
Pearlite	96	178	537	38.36%
Bainite	272	9	3864	93.22%
Class recall	87.77%	92.71%	84.16%	

for test and training performance were close to each other and the model was able to classify unknown test data. For dataset 3, the x-validation performance was 97.94% \pm 0.63% and the training performance was 99.73%. The total accuracy of the test data was 97.47% and hence in the same range as the total test accuracy of dataset 2, which means that the model using 29 parameters instead of 75 also shows reproducible classification results. Dataset 4 showed an x-validation performance of 97.67% \pm 0.68%, a training performance of 99.36% and a total test data accuracy of 97.04%. It can be seen that the test performance of dataset 2 showed lower values than the test performance of datasets 3 and 4, which are in the same range. The divergence between test and training data is also greatest for dataset 2, resulting in the model having less generalizability compared to the other two models.

The performance measurement kappa showed a higher value for datasets 3 and 4, which also indicates that the model can handle data with 29 or 16 parameters better than with 75 parameters. In both cases, the kappa value for the test data was greater than 0.94. The γ values were low in all cases and ranged from 0.000346 to 0.002236. The *C* parameter for datasets 2 and 3 showed lower values than for dataset 4.

The best classification result of testing yielding 97.04% accuracy and based on 16 parameters is shown in Table 8.

For the martensite class, the accuracy rate is 96.48% and precision rate is 96.32%. For the pearlite class, the accuracy rate is 96.88%, with a precision of 77.82%. For the bainite class, the values are 97.41% and 98.52% respectively. As it can be seen for the recall values, only 3–4% of the objects in each class were classified incorrectly. This means that for each individual class the percentage of correctly classified objects is in the same range and that the model can recognize all classes equally well. The lower precision value of pearlite is due to the fact that only 192 objects are available for testing. The number of 40 incorrectly classified martensite objects and 106 incorrectly classified bainite objects is therefore high compared to the total number of test objects in the pearlite class.

Overall, using a combination of parameter groups yielded a higher accuracy rate than using a single parameter group. The kappa values exceed 0.9 for all models, which indicates that the classification is of high quality.

Table 7

Classification results for the three performance measurements of x-validation, test and training and the kappa values for the textural features and morphological parameter data for the three classes pearlite, martensite and bainite.

Dataset	Accuracy x-validation [%]	<i>kappa</i> x-validation	Accuracy training data [%]	Accuracy test data [%]	<i>kappa</i> test data	<i>C value</i> / γ value
Dataset 2	98.03 \pm 1.01	0.970 \pm 0.015	100.00	96.83	0.937	160 000/ 0.002236
Dataset 3	97.94 \pm 0.63	0.969 \pm 0.009	99.73	97.47	0.950	180 000/ 0.000346
Dataset 4	97.67 \pm 0.68	0.965 \pm 0.010	99.36	97.04	0.941	380 000/ 0.000640

Table 8

Confusion matrix for the classification of textural parameters and morphological parameters for complete objects after feature selection for the three classes pearlite, martensite and bainite in Rapid Miner.

Accuracy: 97.04%				
\downarrow Prediction/true \rightarrow	Martensite	Pearlite	Bainite	Class precision
Martensite	2902	5	13	96.32%
Pearlite	40	186	106	77.82%
Bainite	66	1	4472	98.52%
Class recall	96.48%	96.88%	97.41%	

4. Discussion

The classification results of the data mining process show that the textural features represent a good alternative to morphological parameters in classifying the pearlite, martensite and bainite classes of steel. The results for the 8 textural features show a test accuracy of 85.77%, which is in the same range as those for the morphological parameters (86.90%) and those for the substructure (88.33%) [14]. The precision for martensite using textural features is 87.77%, which is lower than the precision for martensite based on the morphological parameters (94.20%). The results for the morphological parameters by Gola et al. show that martensite can already be distinguished very well from pearlite and bainite by its morphology [14]. The higher classification accuracy for martensite using morphological parameters could be due to the different formation mechanism compared to bainite and pearlite. Martensite is formed by diffusionless sliding transformation of the super cooled austenite. Bainite and pearlite are formed by a diffusion-prone mechanism associated with carbide precipitates and a lower dislocation density.

The other two classes can provide higher classification precision for the textural features. For the pearlite class 92.71% and for the bainite class 84.15% are reached compared to 77.80% and 77.30% respectively for the morphological parameters. This is probably due to the fact that the textural parameters are very important for differentiating between these two classes. For the classification based on the morphological parameters, only 2 parameters were used to differentiate the substructure of the objects (density of substructure and gray value ratio). In contrast, dataset 1 consists entirely of textural features, which significantly increases the classification accuracy for pearlite and bainite. The results indicate that the textural features work particularly well for pearlite. The distinction between the ordered lamellar structure and the rather disordered structures of martensite and bainite works particularly well, as has already been discussed by Webel et al. [31]. For the martensite and bainite classes, the separability is not as high as for pearlite. This could also be due to the fact that in small grains, where the substructure is not clearly visible, there is a greater risk of confusion between the two substructures.

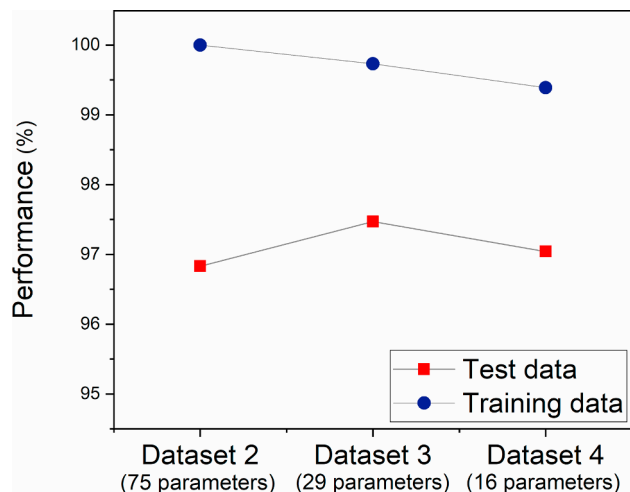


Fig. 3. Visualization of test and training accuracy of the different datasets: dataset 2 based on 75 parameters, dataset 3 based on 29 parameters and dataset 4 based on 16 parameters.

However, the results demonstrate that in view of a meaningful classification a combination of different parameter groups is most promising. By combining the three parameter groups a significant improvement in classification accuracy can be achieved to reach 96.83% (Table 7). This corresponds to a 15.4% increase for morphological object parameters, a 9.6% increase for the substructure parameter and a 12.9% increase for the textural features. In this case, morphological information from the LOM images and structural information from the SEM images is used to build the data mining model. Thus, the data provides a greater information variety regarding the different microstructure classes. In addition to the high accuracy the kappa values of all datasets show values exceeding 0.9, which indicates a high

classification quality.

When reducing the dimension of the model by removing correlated parameters, all pixel-based textural features remain. For both values (amplitude and mean) the correlations of the features are lower than the threshold value of 95%. This illustrates one of the great advantages of using the textural features in data mining approaches rather than the morphological parameters. Out of the 23 morphological parameters, only 9 remain after removing the correlated objects, and 12 out of 44 morphological parameters remain for the substructure. For this reason, all textural features can be used to train the model, as they provide independent information for the model.

The total test accuracy of the classification using dataset 3 based on 29 parameters shows a small increase in performance to 97.47% compared to dataset 2 based on 75 parameters (Fig. 3). In addition, the results for the training data and the test data showing a 2.26% difference are closer together than in dataset 2 (3.17%). Values that are close to each other imply that the model can equally well perform on unknown test data than on training data and generate a reproducible classification. The results demonstrate that dataset 3 can improve the classification results with a view to making the model less complex and it simultaneously increases the generalization. Furthermore, the test accuracy of a classification based on a combination of parameter groups is in the same range when using 75, 29 and 16 parameters. Decreasing the number of parameters to 16 leads to a high testing accuracy and at the same time further reduces the complexity of the model. Therefore, it can be concluded that the 16 parameters contain the information that is needed for making a distinction and suffice for performing a stable classification of the 3 classes based on the given data.

Moreover, all three parameter groups are important for microstructure classification. After the evolutionary feature selection, parameters of each group are still present in the dataset, as can be seen in Table 4. In addition, the parameter groups are equally distributed in the reduced dataset 4. With 5 textural features, 5 morphological parameters for the objects and 6 for the substructure, all parameter groups are represented by approximately one third. The list of parameters in

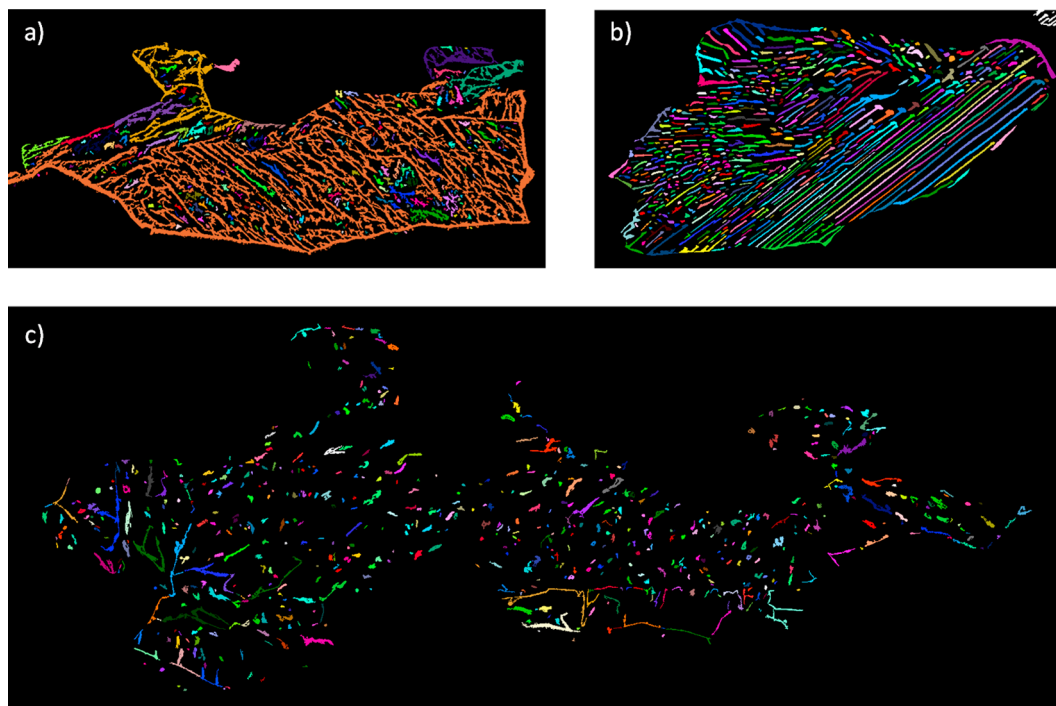


Fig. 4. Combined segmented LOM and SEM images for (a) martensite, (b) pearlite and (c) bainite; the individual cementite particles of the pearlite and bainite class and individual parts of the etching structure of martensite are shown in different colors. These individual particles are used to calculate the substructure parameters.

Table 4, sorted by their importance from the feature ranking, shows that parameters describing the texture have a higher importance than morphological object parameters. The last four parameters are morphological object parameters whereas the 4 most important parameters are morphological substructure parameters. The textural features are in the middle of the parameter list.

The selected morphological parameters show that a combination of different parameter types is necessary to describe the microstructure. On the one hand, shape-based parameters such as axial ratio and convexity, can detect the appearance of the second-phase objects on their line-like and equiaxial shapes and also provide information about the shape of the object boundary. On the other hand, parameters that show the size and scale of the second-phase are needed. The relative area parameter gives a value of the object dimension within a specific microstructure. For example, martensite second-phase objects often appear as large line-like and elongated grains, especially after the rolling process. Bainite microstructures often show rather finely distributed second-phase objects due to their formation. The perimeter and minor axis length parameters show absolute values of the microstructure and provide information about the real size and also about the dimension of the second-phase objects.

The substructure parameters also contain both shape-based and dimension-based parameters. The roundness and area convex to area filled parameters show that the shapes of the cementite precipitations of pearlite and bainite or the etching structure of martensite differ (Fig. 4). The inner structure of bainite is mostly composed of roundish individual particles, whereas the martensitic etching shows network-like structures. These contain many cavities and irregular shapes, which affects these parameters. Depending on the crystallographic orientation, pearlite structures contain from dot shaped to tightened lamellae that have neither cavities nor irregular particle boundaries. The mean feret diameter and convex area are a measure for the dimension of the substructure particles. Cementite lamellae of pearlite and the network structure of martensite cover larger areas within an object than the small cementite particles in the bainite class. This characteristic is also represented by the mean relative area parameter, which also describes whether many small or few large substructure particles exist within an object. The parameter standard deviation of the equivalent diameter shows that the standard deviation for martensitic structures is smaller than for the bainite or pearlite class. This could be due to the fact that the network structures are often linked over the entire object, so that there are only a few individual particles within an object. Pearlite and bainite structures are usually characterized by clearly separated structures, which allows for a large number of particles of different sizes to be selected per object, resulting in a larger standard deviation.

After the feature selection, three amplitude values and two mean values remain for the textural features. The amplitude of the correlation showed the highest weighting. J. Weibel et al. found a high separability of the substructures of the three classes, martensite, pearlite and bainite with the amplitude correlation on square images [31]. The influence of structural irregularities on the texture correlation value is high, if the structure scale is in the order of magnitude of the image resolution, which was the case with structures in the SEM images. For the amplitude value of contrast, a high separability of the classes could also be achieved. This result was still given even in the case of low resolutions of the test images, as shown in J. Weibel et al. [31]. Especially the distinguishability of pearlite from the other two classes on the basis of the contrast value is very pronounced. The reason is that this structure has particularly high gray scale transitions from ferrite to the cementite lamellae and vice versa. This is the result of etching, as the less noble ferrite phase is removed more quickly and the protruding cementite lamellas block the escaping secondary electrons and create a shadow effect. The smaller value for the martensite class results from the etching of the lath or grain boundaries. However, in this case, the interspaces of the laths are not as smooth as in the case of pearlite and therefore show smaller gray value changes. J. Weibel et al. could find no

separability for the mean correlation value and not a significant distinction between martensite and bainite for the mean contrast value. The fact that these features are removed by the feature selection also implies that they are less relevant for the distinction of different microstructural constituents. Conversely, this result also proves that a feature selection by means of evolutionary feature selection offers a very good possibility to find significant parameters of a dataset and to remove features that are not essential for the classification. In the results of J. Weibel et al. the textural feature energy, which describes the uniformity of texture, showed the greatest differences between the microstructural constituents for mean value and for amplitude value [31]. However, it could be shown that the amplitude value is more meaningful than the mean value. This textural feature seems to be particularly sensitive to structures that are several pixels thick and therefore, have uniform white or black areas with many pixels. This explains why pearlite has the highest value due to the lamellae structure, followed by martensite with its grains and lath boundaries and finally, the irregular and not so pronounced structures of bainite after etching.

The mean values of texture homogeneity also showed good separability. One reason for this is that in the pearlite class, for example, the homogeneity within the lamellae is particularly high. This is not so pronounced within the martensite class, but it shows a comparatively higher homogeneity than bainite with its inhomogeneous carbide precipitation. The textural features by J. Weibel et al. for complete objects were not as distinctive as for the square test images, but were still present [31]. The classification studies once again confirm the importance of the amplitude parameters and support the results of the test images, since the features that showed significant results in the test images were selected during the feature selection.

Classification results for dataset 4 covering 16 parameters prove that the model is able to recognize all three classes with approximately the same recall rate (Table 8). This is a big advantage over the classification results based on a single group where the martensite class could be better classified for morphological parameters [14] and the pearlite class could be better classified for textural parameters. For these classes, the problem of misclassification is mainly caused by small objects and not typically appearance of substructure. Combining morphological and substructure parameters and the textural features helps to solve this problem and to achieve uniform classification results for all three classes. With the combination of the parameter groups the amount of test data that is different for the classes with 192 objects in the case of pearlite and with 4591 objects in the case of bainite does not affect the recall result.

The classification results confirm that the correlative approaches of several recording sources are highly beneficial for microstructure classification. If further analysis data such as EBSD based data, hardness values or chemical analyses are available, these can also be used to supplement a full comprehensive microstructure classification. In industrial applications, however, time and cost-intensive measuring methods are often of no interest for economic reasons. In this case, classifications based on microstructure images show an objective and reproducible way of classifying microstructures with high accuracy without the need for information about the manufacturing process or chemistry. In addition to the results shown, initial studies using only LOM images have shown that a classification using morphological parameters of the second phase combined with textural features is feasible. For the three tested classes pearlite, bainite and martensite, the structural differences detectable on LOM images are still sufficient to create successful classification models. However, the microstructural differences on LOM images for various subclasses, especially in the case of bainite with its fine structures, are not significant. In view of the further development of microstructure classification with a finer distinction between microstructural classes will require high-resolution microscopy images.

The high classification results for low carbon steels using the SVM

methodology show classification accuracies which are comparable to approaches with deep learning methods. In this area, S. M. Azimi could achieve a 96% classification accuracy for 4 classes of low carbon steels [37]. The advantage of the SVM method is that the morphological parameters and textural features can be linked to the microstructure and an interpretation of the parameters becomes possible. These parameters can also be used for a quantitative microstructural analysis and thus offer a complete characterization and classification of the microstructures. In contrast, deep-learning-based classification offers the possibility of applying classification to original SEM images. This significantly reduces the time needed for data creation. However, it is not possible to link parameters to the microstructure and understand their meaning. A good way for the future could be to combine both methods with each other to make sure that the classification is as exact as possible. Furthermore, deep-learning methods could help to segment microstructural images and make the data acquisition for SVM classification faster and less complex.

In the future, data mining model based classification needs to be extended to more structural subclasses. For example an extension of the models to further bainite subclasses would bring the goal of a complete structural classification in steel much closer. The distinction between the different bainite classes is of particularly great interest because it is still difficult in today's practice. One further option for future work might be the combination of the morphological parameters and the textural features with a local texture feature such as the local binary pattern (LBP) histogram, as proposed by Guo et al. [30]. This could help finding further substructure parameters that allow a differentiation into further subclasses. Besides, it is conceivable to extend the classification workflow to other two-phase materials with substructure. In order to achieve this, a method has to be found to contrast the two-phase material in such a way that both phases are separate and show a good contrast in microscopy images. Once the objects of the phases have been detected, all other steps of the workflow can be maintained.

5. Conclusion

By using the three different parameter groups for microstructure classification, it was shown that:

- Classification results based on the group of textural features are in the same range as the results based on the group of the morphological parameters and the substructure parameters.
- Textural features showed fewer correlations with each other, which is one of the big advantages over the other two parameter groups.
- Classification results for the three classes martensite, pearlite and bainite show a high accuracy for the textural features in combination with morphological parameters using an SVM model on the given database.
- Accuracies are in the same range using a parameter set of all three groups with 75, 29 and 16 parameters respectively. But decreasing the number of parameters to 16 leads to a high accuracy in testing while simultaneously reducing the complexity of the model further.
- Classification results based on 16 parameters prove that the model is able to recognize all three classes with approximately the same recall rate.
- The high classification accuracy exemplifies that different parameter groups from correlative approaches of different recording sources are highly beneficial for microstructure classification.

6. Data availability

- The raw/processed data required to reproduce these findings cannot be shared at this time due to legal or ethical reasons.
- The raw/processed data required to reproduce these findings cannot be shared at this time as the data also forms part of an ongoing study.

CRedit authorship contribution statement

Jessica Gola: Conceptualization, Methodology, Software, Validation, Formal analysis, Investigation, Data curation, Writing - original draft, Visualization. **Johannes Webel:** Methodology, Software, Formal analysis. **Dominik Britz:** Conceptualization, Methodology, Writing - review & editing, Supervision, Project administration. **Agustina Guitar:** Writing - review & editing, Supervision. **Thorsten Staudt:** Resources, Writing - review & editing, Supervision. **Marc Winter:** Resources, Writing - review & editing, Supervision. **Frank Mücklich:** Conceptualization, Resources, Supervision, Funding acquisition.

References

- [1] T.K. Roy, B. Bhattacharya, C. Ghosh, S.K. Ajamani, *Advanced High Strength Steel - Processing and Applications*, Springer, Singapore, 2018.
- [2] M.A. Smirnov, Classification of low-carbon pipe steels microstructures, *Metallurgist* 54 (2010) 7–8.
- [3] G. Thewlis, Classification and quantification of microstructures in steels, *Mater. Sci. Technol.* 20 (2004) 143–160.
- [4] A. Ramazani, Modelling the effect of microstructural banding on the flow curve behaviour of dual-phase (DP) steels, *Comput. Mater. Sci.* 52 (2012) 46–54.
- [5] N.H. Abid, R.K. Abu Al-Rub, A.N. Palazotto, Micromechanical finite element analysis of the effects of martensite morphology on the overall mechanical behavior of dual phase steel, *Int. J. Solids Struct.* 104–105 (2017) 8–24.
- [6] 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 (3) (2008) 499–508.
- [7] A.-F. Gourgues, H.M. Flower, T.C. Lindley, Electron backscattering diffraction study of acicular ferrite, bainite, and martensite steel microstructures, *Mater. Sci. Technol.* 16 (1) (2000) 26–40.
- [8] S. Zajac, V. Schwinn, K.-H. Tacke, Characterisation and quantification of complex bainitic microstructures in high and ultra-high strength linepipe steel, *Mater. Sci. Forum* (2005).
- [9] D. Britz, J. Webel, A.S. Schneider, F. Mücklich, Identifying and quantifying microstructures in low-alloyed steels: A correlative approach, *Metall. Italiana, Processo termomeccanico* 3 (2017) 5–10.
- [10] D. Britz, J. Webel, J. Gola, F. Mücklich, A correlative approach to capture and quantify substructures by means of image registration, *Practical Metallogr.* 54 (10) (2017) 685–696.
- [11] G.F. Vander Voort, *Metallography: Principles and Practice*, McGraw-Hill, New York, 1984, pp. 216–217.
- [12] E. Beraha, B. Shpigler, *Color metallography*, Am. Soc. Metals (1977).
- [13] 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.
- [14] 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.
- [15] A. Fuchs, Application of microstructural texture parameters to diffusional and displacive transformation products, Birmingham (2005).
- [16] 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.
- [17] 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.
- [18] L. Shapiro, G. Stockman, *Computer Vision*, Prentice H., 2001.
- [19] P. Mather, B. Tso, *Classification methods for remotely sensed data*, CRC Press, London, 2016.
- [20] J.S. Weszka, C.R. Dyer, A. Rosenfeld, Comparative study of texture measures for terrain classification, *IEEE Trans Syst Man Cybern SMC-6* (4) (1976) 269–285.
- [21] R.M. Haralick, K. Shanmugan, I. Dinstein, Textural features for image classification, *IEEE Trans. Syst., Man, Cybernet. SMC-3*(6) (1973) 610–621.
- [22] L. Soh, C. Tsatsoulis, Texture analysis of SAR sea ice imagery using gray level co-occurrence matrices, *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.* 37 (2) (1999) 780–795.
- [23] R.M. Rangayyan, *Biomedical image analysis*, CRC Press, 2004.
- [24] J.P. Yun, S.H. Choi, J.W. Kim, S.W. Kim, Automatic detection of cracks in raw steel block using Gabor filter optimized by univariate dynamic encoding algorithm for searches (uDEAS), *NDT&E Int.* 42 (5) (2009) 389–397.
- [25] K. Wilttschi, A. Pinz, T. Lindeberg, An automatic assessment scheme for steel quality inspection, *Mach. Vis. Appl.* 12 (3) (2000) 113–128.
- [26] X. Liu, Microstructural classification of pearlitic and complex phase steels using image analysis methods, Birmingham, (2014).
- [27] A.A. Ursani, K. Kpalma, J. Ronsin, Texture features based on Fourier transform and Gabor filters: An empirical comparison, *Proceedings - International Conference on Machine Vision, ICMV*, (2007), pp. 67–72.
- [28] P. Brynolfsson, D. Nilsson, T. Torheim, T. Asklund, C. Thellenberg Karlsson, J. Trygg, T. Nyholm, A. Garpebring, Haralick texture features from apparent diffusion coefficient (ADC) MRI images depend on imaging and pre-processing parameters, *Sci. Report* 7 (1) (2017) 1–11.

- [29] 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 (7) (2002) 971–987.
- [30] Z. Guo, L. Zhang, D. Zhang, Rotation invariant texture classification using LBP variance (LBPV) with global matching, *Pattern Recogn.* 43 (3) (2010) 706–719.
- [31] J. Weibel, 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. Characterization* 144 (2018) 584–596.
- [32] A. Velichko, Quantitative 3D characterization of graphite morphologies in cast iron using FIB microstructure tomography, Shaker Verlag, Saarbrücken, 2009.
- [33] J. Roiger, Data mining: a tutorial-based primer, Taylor&Francis Group, 2017.
- [34] 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.
- [35] J. Masci, U. Meier, D. Ciresan, J. Schmidhuber, G. Fricout, Steel defect classification with Max-Pooling Convolutional Neural Networks, *International Joint Conference on Neural Networks (IJCNN)*, (2012), pp. 1–6.
- [36] A.C. Chowdhury, E. Kautz, B. Yener, D. Lewis, Image driven machine learning methods for microstructure recognition, *Comput. Mater. Sci.* 123 (2016) 176–187.
- [37] S.M. Azimi, D. Britz, M. Engstler, M. Fritz, F. Mücklich, Advanced steel microstructure classification by deep learning methods, *Sci. Rep.* 8 (1) (2018).
- [38] J. Ohser, F. Mücklich, Statistical analysis of microstructures in materials science, Karlsruhe, Saarbrücken, 2001.
- [39] M. Hofmann, R. Klinkenberg, *RapidMiner: Data Mining Use, Cases and Business Analytics Applications*, (2014).
- [40] I. Guyon, A. Elisseeff, Special issue on variable and feature selection, *J. Mach. Learn. Res.* 3 (2003).
- [41] B. Schowe, *Feature Selection for high-dimensional data with RapidMiner*, Dortmund (2011).
- [42] A.A. Freitas, A survey of evolutionary algorithms for data mining and knowledge discovery, *Adv. Evolut. Comput., Nat. Comput. Ser.*, Springer (2003).
- [43] J. Weston, C. Watkins, Multi-class support vector machines, Royal Holloway Technical Report CSD-TR-98-04, (1998).
- [44] C.W. Hsu, C.C. Chang, C.J. Lin, *A practical guide to support vector classification*, National Taiwan University, Taipei, 2010.
- [45] J. Richard Landis, Gary G. Koch, The measurement of observer agreement for categorical data, *Biometrics* 33 (1) (1977) 159–174.

6 Fazit

In der vorliegenden Arbeit wurde ein neues Verfahren für eine objektive und reproduzierbare Gefügeklassifizierung niedriglegierter Stähle basierend auf korrelativen mikroskopischen Aufnahmen erarbeitet. Die vorgestellten Klassifizierungsergebnisse zeigen das große Potential der Methode zur objektiven Identifizierung verschiedener vordefinierter Gefügebestandteile mittels der Verfahren des maschinellen Lernens.

Die Nutzung unterschiedlicher Gefügemerkmale zur Erstellung des Klassifizierungsmodells ist hierbei von besonderer Relevanz. Der materialwissenschaftliche Hintergrund der aufgebauten Merkmalsdatenbasis ist einer der wesentlichen Vorteile der vorgestellten Klassifizierungsmethodik. Folglich besteht die Möglichkeit signifikante Merkmale für eine Unterscheidung von Gefügebestandteilen zu identifizieren und diese mit den Erscheinungsformen der Bestandteile auf den mikroskopischen Aufnahmen zu korrelieren. Zusätzlich sind weitere Korrelationen der Merkmale beispielsweise mit den Eigenschaften der Gefüge denkbar.

Die Generalisierbarkeit der Klassifizierungsmodelle und die Robustheit der Klassifizierung könnten zudem weiter gesteigert werden, indem die Datenbasis beispielsweise durch verschiedene Präparationsrouten, zusätzliche korrelative Messdaten (z.B. EBSD) oder 3D-Gefügeinformationen erweitert wird. Zusätzlich besteht die Möglichkeit durch die Hinzunahme weiterer Gefügebestandteile die Klassen im Bereich der Stahlwerkstoffe zu verfeinern.

Der in der vorliegenden Arbeit entwickelte Arbeitsablauf für eine Gefügeklassifizierung kann nicht nur für Stähle genutzt werden, sondern ist auf andere Materialklassen übertragbar. Insgesamt eröffnet eine objektive und reproduzierbare Klassifizierung auf der Basis von Messdaten neue Möglichkeiten zu einem vertieften und umfassenderen Verständnis der komplexen Zusammenhänge zwischen dem Gefüge und den Eigenschaften von Werkstoffen. Die Gefügeklassifizierung wird auch in Zukunft der Schlüssel für eine gefügebasierte Werkstoffentwicklung sein und dazu beitragen Werkstoffe weiterzuentwickeln und neu zu designen.

7 Nicht enthaltene Publikationen

- D. Britz, J. Webel, J. Gola, F. Mücklich, “A Correlative Approach to Capture and Quantify Substructures by Means of Image Registration”, *Practical Metallography* 54 (10), 685-696, 2017
- F. Mücklich, M. Engstler, D. Britz, J. Gola, “Serial Sectioning Techniques – A Versatile Method for Three-Dimensional Microstructural Imaging”, *Practical Metallography* 55 (8), 569-578, 2018
- D. Britz, J. Webel, J. Gola, Y. Steimer, F. Mücklich, “Practical Metallography of Low Carbon Steels–New approaches in Preparation, Imaging and Analysis of Microstructures”, *Microscopy and Microanalysis* 24 (S1), 2226-2227, 2018
- J. Gola, D. Britz, F. Mücklich, “3D-Gefügeforschung und neue Möglichkeiten der zuverlässigen Gefügeklassifizierung durch Kombination mit maschinellem Lernen”, *Metall* 72(11):454-456, 2018

8 Literaturverzeichnis

- [1] J. Gola, D. Britz, and F. Mücklich, “3D-Gefügeforschung und neue Möglichkeiten der zuverlässigen Gefügeklassifizierung durch Kombination mit maschinellem Lernen,” *Metall*, vol. 72, no. 11, 2018.
- [2] F. Mücklich, M. Engstler, D. Britz, J. Barrirero, and P. Rossi, “Why We Need All Dimensions to Solve Both Very Old and Very New Questions in Materials at the Micro-, Nano- and Atomic Scales,” *Pract. Metallogr.*, vol. 52, no. 9, pp. 507–524, 2015.
- [3] B. Ilschner and R. F. Singer, *Werkstoffwissenschaften und Fertigungstechnik*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2016.
- [4] H.-J. Bargel and G. Schulze, *Werkstoffkunde*, 12th ed. Berlin: Springer Vieweg, 2018.
- [5] H.-J. Bargel, H. Hilbrans, K.-H. Hübner, O. Krüger, and G. Schulze, *Werkstoffkunde*, 9th ed. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2005.
- [6] H. Berns and W. Theisen, *Eisenwerkstoffe - Stahl und Gusseisen*, 3rd ed. Berlin Heidelberg New York: Springer, 2008.
- [7] E. Roos and K. Maile, *Werkstoffkunde für Ingenieure*, 2nd ed. Springer, 2004.
- [8] G. Gottstein, *Physikalische Grundlagen der Materialkunde*, 3rd ed. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2007.
- [9] W. W. Seidel and F. 1966- Hahn, *Werkstofftechnik : Werkstoffe - Eigenschaften - Prüfung - Anwendung*. .
- [10] J. Ruge and H. Wohlfahrt, *Technologie der Werkstoffe*, 8th ed. Wiesbaden: Vieweg, 2007.
- [11] W. Weißbach, *Werkstoffkunde*, 16th ed. Vieweg Verlag, 2007.
- [12] W. Köhler, *Atlas der Wärmebehandlung der Stähle*, vol. 6, no. 12. Wiley-Blackwell, 1955.
- [13] E. Macherauch and H.-W. Zoch, *Praktikum in Werkstoffkunde*. Wiesbaden: Springer Fachmedien Wiesbaden, 2014.
- [14] M.-C. Zhao, K. Yang, F.-R. Xiao, and Y.-Y. Shan, “Continuous cooling transformation of undeformed and deformed low carbon pipeline steels,” *Mater. Sci. Eng. A*, vol. 355, no. 1–2, pp. 126–136, Aug. 2003.
- [15] T. K. Roy, B. Bhattacharya, C. Ghosh, and S. K. Ajamani, *Advanced High Strength Steel - Processing and Applications*. Singapore: Springer, 2018.
- [16] T. Takahashi, D. Ponge, and D. Raabe, “Investigation of Orientation Gradients in Pearlite in Hypoeutectoid Steel by use of Orientation Imaging Microscopy,” *Steel Res. Int.*, vol. 78, no. 1, 2007.

- [17] L. Morsdorf, O. Jeannin, D. Barbier, M. Mitsuhashi, D. Raabe, and C. C. Tasan, “Multiple mechanisms of lath martensite plasticity,” *Acta Mater.*, vol. 121, pp. 202–214, 2016.
- [18] S. Morito, X. Huang, T. Furuhashi, T. Maki, and N. Hansen, “The morphology and crystallography of lath martensite in alloy steels,” *Acta Mater.*, vol. 54, no. 19, pp. 5323–5331, 2006.
- [19] S. Morito, H. Tanaka, R. Konishi, T. Furuhashi, and T. Maki, “The morphology and crystallography of lath martensite in Fe-C alloys,” *Acta Mater.*, vol. 51, no. 6, pp. 1789–1799, 2003.
- [20] H. Kitahara, R. Ueji, N. Tsuji, and Y. Minamino, “Crystallographic features of lath martensite in low-carbon steel,” *Acta Mater.*, vol. 54, no. 5, pp. 1279–1288, 2006.
- [21] F. Barcelo, J.-L. Bechade, and B. Fournier, “Orientation relationship in various 9%Cr ferritic/martensitic steels—EBSD comparison between Nishiyama–Wassermann, Kurdjumov–Sachs and Greninger–Troiano,” *Phase Transitions*, vol. 83, no. 8, pp. 601–614, Aug. 2010.
- [22] K. Koumoulos and A. Muehleman, “A theoretical investigation of orientation relationships and transformation strains in steels,” *Acta Crystallogr. Sect. A Found. Adv.*, vol. 73, no. 2, pp. 115–123, 2017.
- [23] V. A. Yardley and E. J. Payton, “Austenite–martensite/bainite orientation relationship: characterisation parameters and their application,” *Mater. Sci. Technol.*, vol. 30, no. 9, pp. 1125–1130, 2014.
- [24] H. K. D. H. Bhadeshia and R. W. K. Honeycombe, *Steels: microstructure and properties.*, 4th ed. Oxford, Cambridge: Butterworth-Heinemann, 2017.
- [25] B. L. Bramfitt and A. O. Benscoter, *Metallographer’s guide practices and procedures for irons and steels*, vol. 95, no. 2. 2003.
- [26] Y. F. Shen, L. N. Qiu, X. Sun, L. Zuo, P. K. Liaw, and D. Raabe, “Effects of retained austenite volume fraction, morphology, and carbon content on strength and ductility of nanostructured TRIP-assisted steels,” *Mater. Sci. Eng. A*, vol. 636, pp. 551–564, 2015.
- [27] W. Bleck, *Werkstoffkunde Stahl für Studium und Praxis*, 6th ed. Institut für Eisenhüttenkunde RWTH Aachen, 2016.
- [28] H. K. D. H. Bhadeshia, *Bainite in steels - Transformations, Microstructures and Properties*, 2nd ed. London: IOM Communications Ltd, 2001.
- [29] H. K. D. H. Bhadeshia, “Martensite and bainite in steels: transformation mechanism & mechanical properties,” *Le J. Phys. IV*, vol. 07, no. C5, pp. C5-367–C5-376, 1997.
- [30] L. C. D. Fielding, “The Bainite Controversy,” *Mater. Sci. Technol.*, vol. 29, no. 4, pp. 383–399, 2013.
- [31] B. L. Bramfitt and J. G. Speer, “A Perspective on the Morphology of Bainite,” *Metall. Trans. A*, vol. 21A, pp. 817–829, 1990.

- [32] G. Krauss and S. W. Thompson, "Ferritic microstructures in continuously cooled low- and ultralow-carbon steels," vol. 35, no. 8, pp. 937–945, 1995.
- [33] S. Zajac, V. Schwinn, and K. H. Tacke, "Characterisation and Quantification of Complex Bainitic Microstructures in High and Ultra-High Strength Linepipe Steels," *Mater. Sci. Forum*, vol. 500–501, pp. 387–394, 2005.
- [34] A. J. DeArdo, "Multi-phase Microstructures and Their Properties in High Strength Low Carbon Steels.," *ISIJ Int.*, vol. 35, no. 8, pp. 946–954, 1995.
- [35] D. Britz, A. Hegetschweiler, M. Roberts, and F. Mücklich, "Reproducible Surface Contrasting and Orientation Correlation of Low-Carbon Steels by Time-Resolved Beraha Color Etching," *Am. Soc. Test. Mater.*, vol. 5, no. 5, pp. 553–563, 2016.
- [36] D. Britz, J. Webel, J. Gola, and F. Mücklich, "A Correlative Approach to Capture and Quantify Substructures by Means of Image Registration," *Pract. Metallogr.*, vol. 54, no. 10, pp. 685–696, 2017.
- [37] K. Zhu, D. Barbier, and T. Iung, "Characterization and quantification methods of complex BCC matrix microstructures in advanced high strength steels," *J. Mater. Sci.*, vol. 48, no. 1, pp. 413–423, 2013.
- [38] M. P. Aarnts, R. A. Rijkenberg, and F. A. Twisk, "Microstructural quantification of multi-phase steels (Micro-quant)," 2011.
- [39] G. F. Vander Voort, "Phase Identification by Selective Etching," in *Applied Metallography*, Boston, MA: Springer US, 1986, pp. 1–19.
- [40] E. Füreder, C. Voit, J. Pühringer, and M. Pohl, "Klassische Ätztechniken und ihre Anwendungen für die quantitative Phasenbestimmung an einem modernen, höherfesten Stahl," *Pract. Metallogr.*, vol. 47, no. 7, pp. 374–387, 2010.
- [41] D. Tomus and H. P. Ng, "In situ lift-out dedicated techniques using FIB–SEM system for TEM specimen preparation," *Micron*, vol. 44, pp. 115–119, 2013.
- [42] C. K. Shui, W. T. Reynolds, G. J. Shiflet, and H. I. Aaronson, "A comparison of etchants for quantitative metallography of bainite and martensite microstructures in Fe-C-Mo alloys," *Metallography*, vol. 21, no. 1, pp. 91–102, 1988.
- [43] J. Angeli, E. Füreder, M. Panholzer, and A. C. Kneissl, "Ätztechniken für die Phasencharakterisierung von niedriglegierten Dual-Phasen- und TRIP-Stählen," *Pract. Metallogr.*, vol. 43, no. 10, pp. 489–504, 2006.
- [44] F. S. LePera, "Improved etching technique to emphasize martensite and bainite in high-strength dual-phase steel," *JOM*, vol. 32, no. 3, pp. 38–39, 1980.
- [45] E. Beraha, "New metallographic reagents for stainless steel and heat-resisting alloys," *J. Iron Steel Inst.*, vol. 204, pp. 248–251, 1966.
- [46] G. Petzow, *Metallographisches, Keramographisches, Plastographisches Ätzen - Eisen Stahl und Gusseisen*, 6th ed. Berlin - Stuttgart: Gebrüder Borntraeger, 1994.

- [47] H. Oettel and H. Schumann, *Metallografie*, 15th ed. Wiley-VCH-Verl, 2011.
- [48] G. F. Vander Voort, "Color Metallography," *Micros. Today*, vol. 13, no. 6, pp. 22–27, 2005.
- [49] H. Klemm, "Anwendung des Natriumthiosulfat-Verfahrens (KLEMM'sche Ätzung)," *Prakt. Met.*, vol. 5, no. 4, pp. 163–177, 1968.
- [50] D. Britz, Y. Steimer, and F. Mücklich, "New Ways in Metallography: Through Controlled Conditions to Objective Microstructure Analysis of Low-Carbon Steels by LePera-Etching," *Mater. Perform. Charact.*, vol. submitted, 2018.
- [51] "Norm DIN EN ISO 643: Mikrophotographische Bestimmung der scheinbaren Korngröße," 2003.
- [52] A. P. Day and T. E. Quedstedt, "A comparison of grain imaging and measurement using horizontal orientation and colour orientation contrast imaging, electron backscatter pattern and optical methods," *J. Microsc.*, vol. 195, no. 3, pp. 186–196, 1999.
- [53] ASM International., *Practical guide to image analysis*. ASM International, 2000.
- [54] G. Ondracek, "Zum Zusammenhang zwischen Eigenschaften und Gefügestruktur mehrphasiger Werkstoffe Teil I: Zielsetzung, Kenntnisstand und stereologische Beschreibung der Gefügestruktur," *Materwiss. Werksttech.*, vol. 8, no. 7, pp. 240–246, 1977.
- [55] J. Ohser and F. Mücklich, "Statistical Analysis of microstructures in material sciences," *Chichester Wile*, 2000.
- [56] C. Thomser, M. Unger, Z. Zhang, J. R. Ohm, and W. Bleck, "Analysis of Merged LOM and SEM Pictures using Innovative Image Processing Methods," *Pract. Metallogr.*, vol. 44, no. 12, pp. 579–590, 2007.
- [57] E. Fürede, "Metallkundliche Charakterisierung von modernen niedriglegierten , bainitischen Stählen," Universität Wien, 2010.
- [58] M. D. Fischer, "Quantitative Analyse feinkörniger , komplexer und mehrphasiger Mikrostrukturen," Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen, 2015.
- [59] O. Man, L. Pantělejev, and Z. Pešina, "EBSD analysis of phase compositions of trip steel on various strain levels," *Mater. Eng.*, vol. 16, no. 2, pp. 15–21, 2009.
- [60] J.-Y. Kang *et al.*, "Phase Analysis of Steels by Grain-averaged EBSD Functions," *ISIJ Int.*, vol. 51, no. 1, pp. 130–136, 2011.
- [61] S. L. Shrestha, A. J. Breen, P. Trimby, G. Proust, S. P. Ringer, and J. M. Cairney, "An automated method of quantifying ferrite microstructures using electron backscatter diffraction (EBSD) data," *Ultramicroscopy*, vol. 137, pp. 40–47, 2014.
- [62] S. I. Wright and M. M. Nowell, "EBSD Image Quality Mapping," *Microsc. Microanal.*, vol. 12, no. 01, pp. 72–84, 2006.

- [63] S. I. Wright, M. M. Nowell, and D. P. Field, “A Review of Strain Analysis Using Electron Backscatter Diffraction,” *Microsc. Microanal.*, vol. 17, no. 03, pp. 316–329, 2011.
- [64] J. Caplan, M. Niethammer, R. M. Taylor, and K. J. Czymmek, “The power of correlative microscopy: multi-modal, multi-scale, multi-dimensional,” *Curr. Opin. Struct. Biol.*, vol. 21, no. 5, pp. 686–693, 2011.
- [65] B. Zitová and J. Flusser, “Image registration methods: a survey,” *Image Vis. Comput.*, vol. 21, no. 11, pp. 977–1000, 2003.
- [66] J. Schindelin *et al.*, “Fiji: an open-source platform for biological-image analysis,” *Nat. Methods*, vol. 9, no. 7, pp. 676–682, 2012.
- [67] J. Schmid *et al.*, “Textural identification in the quantitative analysis of steel microstructures,” *Prakt. Metallogr.*, vol. 38, no. 4, pp. 189–196, 2001.
- [68] N. M. Zaitoun and M. J. Aqel, “Survey on Image Segmentation Techniques,” in *Procedia Computer Science*, 2015, vol. 65, pp. 797–806.
- [69] Zeiss, “AxioVision User’s Guide Release 4.9.1 SE64.” GmbH, Carl Zeiss Microscopy, Jena, p. 1106, 2013.
- [70] Aquinto, “a4i Benutzerhandbuch Erweiterte Bildanalyse.” Aquinto AG, Berlin, 2013.
- [71] A. Velichko, F. Mücklich, and U. Sonntag, “Bildanalytische Identifizierung und Klassifizierung der Graphitmorphologie in Gusseisen,” pp. 2–7.
- [72] R. Ruxanda and D. M. Stefanescu, “Graphite shape characterisation in cast iron—from visual estimation to fractal dimension,” *Int. J. Cast Met. Res.*, vol. 14, no. 4, pp. 207–216, 2002.
- [73] J. Li, L. Lu, and M. O. Lai, “Quantitative analysis of the irregularity of graphite nodules in cast iron,” *Mater. Charact.*, vol. 45, no. 2, pp. 83–88, 2000.
- [74] R. M. Haralick, “Statistical and Structural Approaches to Texture,” vol. 67, no. 5, pp. 786–804, 1979.
- [75] T. Ojala, M. Pietikäinen, and T. Mäenpää, “Multiresolution gray-scale and rotation invariant texture classification with local binary patterns,” *IEEE Trans. Pattern Anal. Mach. Intell.*, vol. 24, no. 7, pp. 971–987, 2002.
- [76] R. Haralick, K. Shanmugan, and I. Dinstein, “Textural features for image classification,” *IEEE Trans. Syst. Man Cybern.*, vol. 3, no. 6, pp. 610–621, 1973.
- [77] M. H. Bharati, J. J. Liu, and J. F. MacGregor, “Image texture analysis: methods and comparisons,” *Chemom. Intell. Lab. Syst.*, vol. 72, no. 1, pp. 57–71, 2004.
- [78] E. S. Gadelmawla, A. E. Eladawi, O. B. Abouelatta, and I. M. Elewa, “Application of computer vision for the prediction of cutting conditions in milling operations,” *Proc. Inst. Mech. Eng. Part B J. Eng. Manuf.*, vol. 223, no. 7, pp. 791–800, 2009.

- [79] S. Dutta, K. Barat, A. Das, S. Kumar, A. K. Shukla, and H. Roy, "Characterization of micrographs and fractographs of Cu-strengthened HSLA steel using image texture analysis," *MEASUREMENT*, vol. 47, pp. 130–144, 2014.
- [80] I. H. Witten, E. Frank, M. A. Hall, and C. J. Pal, *Data mining: practical machine learning tools and techniques*, 4th ed. Cambridge: Elsevier, 2016.
- [81] E. Beraha and Shpigler B., *Color metallography*. Metals Park, Ohio: American Society for Metals, 1977.
- [82] D. Britz, J. Webel, F. Mücklich, and A. S. Schneider, "Identifying and quantifying microstructures in low-alloyed steels. A correlative approach Thermomechanical processing," *Process. termomeccanico*, vol. 3, pp. 5–10, 2017.
- [83] H. Terasaki, Y. Miyahara, K. Hayashi, K. Moriguchi, and S. Morito, "Digital identification scheme for steel microstructures in low-carbon steel," *Mater. Charact.*, vol. 129, pp. 305–312, 2017.
- [84] A. J. DeArdo, C. I. Garcia, K. Cho, and M. Hua, "New method of characterizing and quantifying complex microstructures in steels," *Mater. Manuf. Process.*, vol. 25, no. 1–3, pp. 33–40, 2010.
- [85] E. Anelli and P. E. Di-Nunzio, "Classification of microstructures of low carbon steels: preparation of a set of standard micrographs," 1996.
- [86] D. Abson and R. Dolby, "A scheme for the quantitative description of ferritic weld metal microstructures," *Int. Inst. Weld.*, 1980.
- [87] Y. Kikuta, "Classification of microstructures in low-C, low-alloy steel weld metal and terminology," 1983.
- [88] E. M. Araki T, Kozasu I, Tankechi H, Shibata K and Tamehiro H, "Atlas for bainitic microstructures," Tokyo, 1992.
- [89] G. Thewlis, "Classification and quantification of microstructures in steels," *Mater. Sci. Technol.*, vol. 20, no. 2, pp. 143–160, 2004.
- [90] M. A. Smirnov, I. Y. Pyshmintsev, and A. N. Boryakova, "Classification of low-carbon pipe steel microstructures," *Metallurgist*, 2010.
- [91] M. Y. Matrosov, I. V. Lyasotskii, A. A. Kichkina, D. L. D'yakonov, and A. A. Efimov, "Microstructure in low-carbon low-alloy high-strength pipe steel," *Steel Transl.*, 2012.
- [92] Y. Ohmori, H. Ohtsubo, Y. C. Jung, S. Okaguchi, and H. Ohtani, "Morphology of bainite and widmanstätten ferrite," *Metall. Mater. Trans. A*, 1994.
- [93] H. I. Aaronson, W. T. Reynolds, G. J. Shiflet, and G. Spanos, "Bainite viewed three different ways," *Metall. Trans. A*, 1990.
- [94] W. T. Reynolds, Jr., H. I. Aaronson, and G. Spanos, "A Summary of the Present Diffusionist Views on Bainite," *Mater. Trans. JIM*, vol. 32, no. 8, pp. 737–746, 1991.

- [95] U. Lotter and H. P. Hougardy, "The Characterization of Bainitic Microstructures," *Pract. Metallogr.*, vol. 29, no. 3, pp. 151–157, 1992.
- [96] F. Gerdemann, *Bainite in medium carbon steels*. Aachen: Shaker Verlag GmbH, 2010.
- [97] W. Song, "Characterization and simulation of bainite transformation in high carbon bearing steel 100Cr6," RWTH Aachen University, 2014.
- [98] J. Ohser, K. Sandau, W. Stets, and W. Gerber, "Image Analytical Characterization of Graphite in Grey Cast Iron and Classification of Lamellar Arrangement.," *Pract. Met.*, vol. 40, no. 9, pp. 454–473, 2003.
- [99] P. Rossi, E. Engstler, and F. Muecklich, "Quantitative Classification and Assessment of Sr Modification in Hypoeutectic Al-Si and Al-Si-Mg Alloys," *Pract. Metallogr.*, vol. 52, no. 10, pp. 571–589, 2015.
- [100] W. Gerber, W. Stets, and J. Ohser, "Bildanalytische Klassifikation von Lamellengraphit in Gusseisen," *Giessereiforschung*, 2002.
- [101] X. Liu, "Microstructural Characterisation of Pearlitic and Complex Phase Steels Using Image Analysis Methods," University of Birmingham, 2014.
- [102] T. A. Runkler, *Data Mining-Modelle und Algorithmen intelligenter Datenanalyse*, 2nd ed. Wiesbaden: Springer Fachmedien, 2015.
- [103] T. Mueller, A. G. Kusne, and R. Ramprasad, "Machine Learning in Materials Science," in *Recent Progress and Emerging Applications*, John Wiley & Sons, Ltd, 2016, pp. 186–273.
- [104] D. M. Dimiduk, E. A. Holm, and S. R. Niezgod, "Perspectives on the Impact of Machine Learning, Deep Learning, and Artificial Intelligence on Materials, Processes, and Structures Engineering," *Integr. Mater. Manuf. Innov.*, vol. 7, no. 3, pp. 157–172, 2018.
- [105] J. Han, M. Kamber, and J. Pei, *Data mining: concepts and techniques*, 3rd ed. Waltham: Elsevier, 1992.
- [106] D. J. Hand, "Principles of Data Mining," *Drug Saf.*, vol. 30, no. 7, pp. 621–622, 2007.
- [107] N. Neogi, D. K. Mohanta, and P. K. Dutta, "Review of vision-based steel surface inspection systems," *EURASIP J. Image Video Process.*, vol. 2014, no. 1, p. 50, 2014.
- [108] R. Gong, C. Wu, and M. Chu, "Steel surface defect classification using multiple hyperspheres support vector machine with additional information," *Chemom. Intell. Lab. Syst.*, vol. 172, pp. 109–117, 2018.
- [109] M. Xiao, M. Jiang, G. Li, L. Xie, and L. Yi, "An evolutionary classifier for steel surface defects with small sample set," *EURASIP J. Image Video Process.*, vol. 2017, no. 1, p. 48, 2017.
- [110] K. Xu, Y. Ai, and X. Wu, "Application of multi-scale feature extraction to surface defect classification of hot-rolled steels," *Int. J. Miner. Metall. Mater.*, vol. 20, no. 1, pp. 37–41, 2013.

- [111] P. Caleb and M. Steuer, "Classification of surface defects on hot rolled steel using adaptive learning methods," in *KES'2000. Fourth International Conference on Knowledge-Based Intelligent Engineering Systems and Allied Technologies. Proceedings (Cat. No.00TH8516)*, 2000, vol. 1, pp. 103–108.
- [112] D. D. Brzakovic and N. Vujovic, "Designing a defect classification system: A case study," *Pattern Recognit.*, vol. 29, no. 8, pp. 1401–1419, 1996.
- [113] T. Piironen, O. Silven, M. Pietikäinen, T. Laitinen, and E. Strömmer, "Automated visual inspection of rolled metal surfaces," *Mach. Vis. Appl.*, vol. 3, no. 4, pp. 247–254, 1990.
- [114] S. Zhou, Y. Chen, D. Zhang, J. Xie, and Y. Zhou, "Classification of surface defects on steel sheet using convolutional neural networks," *Mater. Tehnol.*, vol. 51, no. 1, pp. 123–131, 2017.
- [115] J. Masci, U. Meier, D. Ciresan, J. Schmidhuber, and G. Fricout, "Steel defect classification with Max-Pooling Convolutional Neural Networks," in *The 2012 International Joint Conference on Neural Networks (IJCNN)*, 2012, pp. 1–6.
- [116] Y. Tian, M. Fu, and F. Wu, "Steel plates fault diagnosis on the basis of support vector machines," *Neurocomputing*, vol. 151, no. 1, pp. 296–303, 2015.
- [117] A. R. Kitahara and E. A. Holm, "Microstructure Cluster Analysis with Transfer Learning and Unsupervised Learning," *Integr. Mater. Manuf. Innov.*, vol. 7, no. 3, pp. 148–156, 2018.
- [118] Y. Liu, T. Zhao, W. Ju, and S. Shi, "Materials discovery and design using machine learning," *J Mater.*, vol. 3, no. 3, pp. 159–177, 2017.
- [119] Y. Zhang and A. H. W. Ngan, "Extracting dislocation microstructures by deep learning," *Int. J. Plast.*, vol. 115, pp. 18–28, 2019.
- [120] J. Ling, M. Hutchinson, E. Antono, B. DeCost, E. A. Holm, and B. Meredig, "Building data-driven models with microstructural images: Generalization and interpretability," *Mater. Discov.*, vol. 10, pp. 19–28, 2017.
- [121] N. Lubbers, T. Lookman, K. Barros, T. Division, and L. Alamos, "Inferring low-dimensional microstructure representations using convolutional neural networks," pp. 1–25, 2016.
- [122] A. Cecen, H. Dai, Y. C. Yabansu, S. R. Kalidindi, and L. Song, "Material structure-property linkages using three-dimensional convolutional neural networks," *Acta Mater.*, vol. 146, pp. 76–84, 2018.
- [123] S. Singh and M. Sharma, "Texture Analysis Experiments with Meastex and Vistex Benchmarks," in *Advances in Pattern Recognition- ICAPR 2001*, Springer, Berlin, Heidelberg, 2001, pp. 419–426.
- [124] R. R. Picard, C. Graczyk, S. Mann, J. Wachman, and L. Picard, "VisTex benchmark database of color textured images," Media Laboratory, Massachusetts Institute of Technology (MIT), Cambridge, 1995.

- [125] G. Smith and I. Burns, “Meastex image texture database and test suite,” <http://www.texturesynthesis.com/meastex/meastex.html>, 1997. .
- [126] J. Deng, W. Dong, R. Socher, L.-J. Li, Kai Li, and Li Fei-Fei, “ImageNet: A large-scale hierarchical image database,” in *2009 IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition*, 2009, pp. 248–255.
- [127] P. P. Ohanian and R. C. Dubes, “Performance evaluation for four classes of textural features,” *Pattern Recognit.*, vol. 25, no. 8, pp. 819–833, 1992.
- [128] M. F. Augusteijn, L. E. Clemens, and K. A. Shaw, “Performance evaluation of texture measures for ground cover identification in satellite images by means of a neural network classifier,” *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.*, vol. 33, no. 3, pp. 616–626, 1995.
- [129] G. Xian, “An identification method of malignant and benign liver tumors from ultrasonography based on GLCM texture features and fuzzy SVM,” *Expert Syst. Appl.*, vol. 37, no. 10, pp. 6737–6741, 2010.
- [130] B. L. DeCost, M. D. Hecht, T. Francis, B. A. Webler, Y. N. Picard, and E. A. Holm, “UHCSDb: UltraHigh Carbon Steel Micrograph DataBase,” *Integr. Mater. Manuf. Innov.*, vol. 6, no. 2, pp. 197–205, 2017.
- [131] D. T. Larose and C. D. Larose, *Discovering knowledge in data : an introduction to data mining*, 2nd ed. Hoboken, New Jersey: John Wiley& Sons, 2014.
- [132] U. Fayyad, G. Piatetsky-Shapiro, and P. Smyth, “From Data Mining to Knowledge Discovery in Databases,” *AI Mag.*, vol. 17, no. 3, pp. 37–37, 1996.
- [133] Y. LeCun, Y. Bengio, and G. Hinton, “Deep learning,” *Nature*, vol. 521, no. 7553, pp. 436–444, 2015.
- [134] W. S. McCulloch and W. Pitts, “A logical calculus of the ideas immanent in nervous activity,” *Bull. Math. Biophys.*, vol. 5, no. 4, pp. 115–133, 1943.
- [135] J. Schmidhuber, “Deep learning in neural networks: An overview,” *Neural Networks*, vol. 61, pp. 85–117, 2015.
- [136] Y. LeCun, Y. Bengio, and G. Hinton, “Deep learning,” *Nature*, vol. 521, no. 7553, pp. 436–444, 2015.
- [137] K. Roberts, G. Weikum, and F. Mücklich, “Examinations on the Automatic Classification of Lamellar Graphite Using the Support Vector Machine,” *Pract. Metallogr.*, vol. 42, no. 8, pp. 396–410, 2004.
- [138] J. Ohser and F. Mücklich, *Statistical Analysis of Microstructures in Materials Science*. Chichester: Wiley, 2000.
- [139] R. M. Haralick, K. Shanmugam, and I. Dinstein, “Textural features for image classification,” *IEEE Trans. Syst. Man Cybern.*, vol. SMC-3, no. 6, pp. 610–621, 1973.
- [140] A. Velichko, “Quantitative 3D Characterization of Graphite Morphologies in Cast Iron using FIB Microstructure Tomography,” Universität des Saarlandes, 2008.

- [141] A. Velichko and F. Mücklich, “Shape Analysis and Classification of Irregular Graphite Morphology in Cast Iron,” *Pract. Metallogr.*, vol. 43, no. 4, pp. 192–208, 2006.
- [142] C. Richter, “Klassifikation von Werkstoffgefügebildern aufgrund teilchenbasierter Kenngrößen,” Masterthesis, Universität des Saarlandes, 2005.
- [143] K. Gajalakshmi, S. Palanivel, N. J. Nalini, and S. Saravanan, “Automatic classification of cast iron grades using support vector machine,” *Optik (Stuttg.)*, vol. 157, pp. 724–732, 2018.
- [144] F. Iacoviello, D. Iacoviello, V. Di Cocco, A. De Santis, and L. D’Agostino, “Classification of ductile cast iron specimens based on image analysis and support vector machine,” *Procedia Struct. Integr.*, vol. 3, pp. 283–290, 2017.
- [145] B. L. DeCost and E. A. Holm, “A computer vision approach for automated analysis and classification of microstructural image data,” *Comput. Mater. Sci.*, vol. 110, pp. 126–133, 2015.
- [146] B. L. DeCost, H. Jain, A. D. Rollett, and E. A. Holm, “Computer Vision and Machine Learning for Autonomous Characterization of AM Powder Feedstocks,” *JOM*, vol. 69, no. 3, pp. 456–465, 2017.
- [147] J. Komenda, “Automatic recognition of complex microstructures using the Image Classifier,” *Mater. Charact.*, vol. 46, no. 2–3, pp. 87–92, 2001.
- [148] D. S. Bulgarevich, S. Tsukamoto, T. Kasuya, M. Demura, and M. Watanabe, “Pattern recognition with machine learning on optical microscopy images of typical metallurgical microstructures,” *Sci. Rep.*, vol. 8, no. 1, p. 2078, 2018.
- [149] K. Tsutsui, H. Terasaki, T. Maemura, K. Hayashi, K. Moriguchi, and S. Morito, “Microstructural diagram for steel based on crystallography with machine learning,” *Comput. Mater. Sci.*, vol. 159, pp. 403–411, 2019.
- [150] A. Chowdhury, E. Kautz, B. Yener, and D. Lewis, “Image driven machine learning methods for microstructure recognition,” *Comput. Mater. Sci.*, vol. 123, pp. 176–187, 2016.
- [151] B. L. DeCost, T. Francis, and E. A. Holm, “Exploring the microstructure manifold: image texture representations applied to ultrahigh carbon steel microstructures,” no. May, pp. 1–20, 2017.
- [152] R. Kondo, S. Yamakawa, Y. Masuoka, S. Tajima, and R. Asahi, “Microstructure recognition using convolutional neural networks for prediction of ionic conductivity in ceramics,” *Acta Mater.*, vol. 141, pp. 29–38, 2017.
- [153] B. L. DeCost and E. A. Holm, “Characterizing powder materials using keypoint-based computer vision methods,” *Comput. Mater. Sci.*, vol. 126, pp. 438–445, 2017.
- [154] G. Lorena, G. Robinson, P. Stefania, and C. Pasquale, “Automatic Microstructural Classification with Convolutional Neural Network,” in *Springer*, 2018, pp. 170–181.

- [155] S. M. Azimi, D. Britz, M. Engstler, M. Fritz, and F. Mücklich, “Advanced Steel Microstructural Classification by Deep Learning Methods,” *Sci. Rep.*, vol. 8, no. 1, pp. 1–14, 2018.
- [156] T. Dahmen *et al.*, “Feature Adaptive Sampling for Scanning Electron Microscopy,” *Sci. Rep.*, vol. 6, no. 1, p. 25350, 2016.
- [157] I. Arganda-Carreras *et al.*, “Trainable Weka Segmentation: a machine learning tool for microscopy pixel classification,” *Bioinformatics*, vol. 33, no. 15, pp. 2424–2426, 2017.
- [158] B. L. DeCost, T. Francis, and E. A. Holm, “High throughput quantitative metallography for complex microstructures using deep learning: A case study in ultrahigh carbon steel,” *Microsc. Microanal.*, vol. 25, no. 1, pp. 21–29, 2019.
- [159] C. J. C. Burges, “A Tutorial on Support Vector Machines for Pattern Recognition,” *Data Min. Knowl. Discov.*, vol. 2, no. 2, pp. 121–167, 1998.
- [160] C. Hsu, C. Chang, and C. Lin, “A practical guide to support vector classification,” *researchgate.net*, 2003.
- [161] J. Ortegon, R. Ledesma-Alonso, R. Barbosa, J. Vázquez Castillo, and A. Castillo Atoche, “Material phase classification by means of Support Vector Machines,” *Comput. Mater. Sci.*, vol. 148, pp. 336–342, 2018.
- [162] A. Ben-Hur and J. Weston, “A User’s Guide to Support Vector Machines,” in *Data mining techniques for the life sciences*, Springer, 2010, pp. 223–239.
- [163] A. J. Smola and B. Schölkopf, “A tutorial on support vector regression,” *Stat. Comput.*, vol. 14, no. 3, pp. 199–222, 2004.
- [164] T. Runkler, *Data Mining: Methoden und Algorithmen intelligenter Datenanalyse*, 1st ed. Wiesbaden: Vieweg+Teubner, 2010.
- [165] Y. Liu, T. Zhao, W. Ju, and S. Shi, “Materials discovery and design using machine learning,” *J. Mater.*, vol. 3, no. 3, pp. 159–177, 2017.
- [166] D. M. Hawkins, “The Problem of Overfitting,” *J. Chem. Inf. Model.*, vol. 44, no. 1, pp. 1–12, 2004.
- [167] C. Hsu and C. Lin, “A comparison of methods for multiclass support vector machines,” *IEEE Trans. Neural Networks*, vol. 13, no. 2, pp. 415–425, 2002.
- [168] C.-C. Chang and C.-J. Lin, “LIBSVM: A library for support vector machines,” *ACM Trans. Intell. Syst. Technol.*, vol. 2, no. 3, pp. 1–27, 2011.
- [169] I. Guyon, “An Introduction to Variable and Feature Selection 1 Introduction,” vol. 3, pp. 1157–1182, 2003.
- [170] S. Lee, V. Sivakumar, and K. Morik, “Feature Selection for high-dimensional Data with Rapidminer,” *Tech. Rep.*, 2011.
- [171] Y.-W. Chen and C.-J. Lin, “Combining SVMs with Various Feature Selection Strategies,” in *Feature Extraction*, Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2006, pp. 315–324.

- [172] I. Guyon and A. Elisseeff, "An Introduction to Feature Extraction," in *Feature Extraction*, Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2006, pp. 1–25.
- [173] A. A. Freitas, "A Survey of Evolutionary Algorithms for Data Mining and Knowledge Discovery," in *Advances in Evolutionary Computing*, Springer, Berlin, Heidelberg, 2003, pp. 819–845.
- [174] O. Allouche, A. Tsoar, and R. Kadmon, "Assessing the accuracy of species distribution models: prevalence, kappa and the true skill statistic (TSS)," *J. Appl. Ecol.*, vol. 43, no. 6, pp. 1223–1232, 2006.
- [175] J. Davis and M. Goadrich, "The relationship between Precision-Recall and ROC curves," in *Proceedings of the 23rd international conference on Machine learning - ICML '06*, 2006, pp. 233–240.
- [176] M. J. Ortiz, A. R. Formaggio, and J. C. N. Epiphonio, "Classification of croplands through integration of remote sensing, GIS, and historical database," *Int. J. Remote Sens.*, vol. 18, no. 1, pp. 95–105, 1997.
- [177] G. H. Rosenfield and K. Fitzpatrick-Lins, "A coefficient of agreement as a measure of thematic classification accuracy.," *Photogramm. Eng. Remote Sensing*, vol. 52, no. 2, pp. 223–227, 1986.
- [178] M. Sokolova and G. Lapalme, "A systematic analysis of performance measures for classification tasks," *Inf. Process. Manag.*, vol. 45, no. 4, pp. 427–437, 2009.
- [179] C. Liu, P. M. Berry, T. P. Dawson, and R. G. Pearson, "Selecting thresholds of occurrence in the prediction of species distributions," *Ecography (Cop.)*, vol. 28, no. 3, pp. 385–393, 2005.
- [180] A. Ben-David, "Comparison of classification accuracy using Cohen's Weighted Kappa," *Expert Syst. Appl.*, vol. 34, no. 2, pp. 825–832, 2008.
- [181] J. Cohen, "A Coefficient of Agreement for Nominal Scales," *Educ. Psychol. Meas.*, vol. 20, no. 1, pp. 37–46, 1960.
- [182] N. Harste, "Objektive Gefügeklassifizierung von Dual-Phasen-Stählen mittels DataMining," Universität des Saarlandes, 2015.
- [183] D. Britz, "Stahlgefüge besser verstehen – Kontrastierung, Bildanalyse und Klassifizierung niedriglegierter Stähle," Universität des Saarlandes, 2019.
- [184] M. Ludovici, "Untersuchung von Data Mining Methoden zur automatisierten Klassifizierung von zweiphasigen Stahlgefügen," Hochschule für Technik und Wirtschaft des Saarlandes, 2017.
- [185] S. Haykin, *Neural networks and learning machines*. 3rd ed. New Jersey: Pearson Education Prentice Hall, 2009.
- [186] S. M. Lößlein, "Korrelative 3D-Serienschnitttomographie an Dualphasenstählen mittels Licht- und Rasterelektronenmikroskopie," Universität des Saarlandes, 2017.

- [187] F. Mücklich, M. Engstler, D. Britz, and J. Gola, “Serial Sectioning Techniques – a Versatile Method for Three-Dimensional Microstructural Imaging,” *Pract. Metallogr.*, vol. 55, no. 8, pp. 569–578, 2018.
- [188] A. Brand, L. Allen, M. Altman, M. Hlava, and J. Scott, “Beyond authorship: attribution, contribution, collaboration, and credit,” *Learn. Publ.*, vol. 28, no. 2, pp. 151–155, 2015.

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 2.1: Eisen-Kohlenstoff-Diagramm mit den Phasen: Schmelze (S), δ -Ferrit (δ -F), Austenit (A), Ferrit (F), Zementit (Z), Graphit (G). Die gestrichelten Linien zeigen das stabile und die durchgezogenen Linien das metastabile System. Im Punkt C tritt das Eutektikum bei einer Temperatur von 1147°C auf. Die eutektoide Umwandlung erfolgt bei 723°C im Punkt S (modifiziert nach [6]).	4
Abbildung 2.2: Darstellung eines kontinuierlichen ZTU-Diagramms mit einer Austenitisierungs-temperatur von 850 °C und 10 min Haltezeit eines 42CrMo4 Stahls. Bei langsamer Abkühlung wird der Bereich Ferrit / Perlit durchlaufen. Bei schnelleren Abkühlungen geht das Gefüge in ein gleichgewichtsfernes Bainit- und Martensitgefüge über. Die Härte steigt ebenfalls mit der schnelleren Abkühltemperatur aufgrund der Konzentration an Fehlern an. M_s und M_f sind die Temperaturen für Beginn (start) und Ende (finish) der Martensitbildung. Die Zahlen entlang der Abkühlkurven kennzeichnen die Gefügemengen in Prozent (modifiziert nach [6]).	6
Abbildung 2.3: REM-Aufnahme eines geätzten perlitisch-ferritischen Stahls. Die Ferritkörner sind durch die Korngrenzen voneinander getrennt und die Zweitphase zeigt eine für Perlit typische Lamellenstruktur.	7
Abbildung 2.4: Schematische Darstellung der Beziehung der martensitischen Lattenpakete und dem ehemaligen Austenitkorn a) und eine REM-Aufnahme eines ferritisch-martensitischen Gefüges b) (modifiziert nach [17]).	9
Abbildung 2.5: REM-Aufnahmen und schematische Darstellungen der Morphologie der Unterklassen a) oberer Bainit, b) unterer Bainit und c) granularer Bainit mit Martensit / Austenit-Inseln als kohlenstoffreiche Bereiche. In der REM-Aufnahme ist der bainitische Ferrit dunkel und der Zementit und die Korngrenzen hell dargestellt. Die schematischen Darstellungen d), e) und f) sind an LIMI-Aufnahmen angeglichen, in welchen der bainitische Ferrit hell und der Zementit bzw. die kohlenstoffreiche Bereiche dunkel erscheinen (modifiziert nach [29],[30]).	11

Abbildung 2.6: Darstellung einer Strukturätzung am Beispiel einer REM-Aufnahme. REM-Aufnahme im Sekundärelektronenkontrast mit Ferritkörnern und einem kohlenstoffreichen Bereich a). Höhenprofil entlang der roten Linie b). Die Kornflächen werden aufgrund unterschiedlicher Potentiale schneller abgetragen als die Korngrenzen. Orientierungsunterschiede zwischen den Ferritkörnern, die ebenfalls das Potential beeinflussen, führen zudem zu einem unterschiedlichen Abtrag der Ferritkörner.....	15
Abbildung 2.7: Schematische Darstellung des Arbeitsablaufs der Bildregistrierung am Beispiel eines zweiphasigen Gefüges. Die invertierte LIMI-Aufnahme a) und die REM-Aufnahme b) der gleichen Probenposition mit vergrößertem Ausschnitt der extrahierten Merkmale (gelbe Kreuze) vor der Registrierung. Registrierte LIMI-Aufnahme c), welche an das REM-Referenzbild angeglichen ist.....	19
Abbildung 2.8: Verschiedene Möglichkeiten morphologische oder texturbasierte Merkmale aus mikroskopischen Aufnahmen mittels Bildanalyse auszuwerten.....	20
Abbildung 2.9: Schematische Darstellung der Regionensegmentierung nach Schwellwert. Zweiphasiges Stahlgefüge mit ferritischen Bereichen und kohlenstoffreichen Bereichen nach einer Beraha Ätzung a). Binärbild nach Schwellwertsegmentierung mit den Objekten der kohlenstoffreichen Bereiche in weiß b).....	21
Abbildung 2.10: Segmentierte LIMI-Aufnahme auf welcher die Objekte detektiert und nummeriert sind a) und schematische Darstellung typischer morphologischer Parameter (Fläche, konvexer Umfang, Umfang, maximaler Feret-Durchmesser) für ein Bildobjekt b).	22
Abbildung 2.11: Überblick über die zwei hauptsächlich genutzten Wege in der Stahlklassifizierung (modifiziert nach [25]).	26
Abbildung 2.12: Klassifizierungsschema für Bainit anhand der auftretenden Morphologie und Gefügebestandteile nach Bramfitt und Speer (modifiziert nach [31]).	37
Abbildung 2.13: Verschiedene Bainitarten nach Zajac et al. für niedrigkohlige Stähle: oberer Bainit a), degenerierter oberer Bainit b), unterer Bainit c), degenerierter unterer Bainit d) und granularer Bainit e). Eine Unterscheidung der verschiedenen Bainitarten ist aufgrund der Missorientierungsverteilung der Korngrenzen möglich f) (modifiziert nach [33]). ..	40

Abbildung 2.14: Schematische Darstellung der Klassifizierung einer unbekanntem Gefügeaufnahme nach dem traditionellen Weg der Gefügeklassifizierung mit subjektivem Klassifizierungsergebnis im Vergleich zu den neuen Wegen der Klassifizierung durch Erstellen eines Modells auf Basis der Methoden des maschinellen Lernens mit objektivem Klassifizierungsergebnis.	43
Abbildung 2.15: Schematische Darstellung des Aufbaus eines Klassifizierungsmodells basierend auf einer Datenbank mit vorklassifizierten Daten, welche aus unterschiedlichen Messungen gewonnen werden können und gängigen Klassifizierungsalgorithmen. Das final erstellte Modell kann neue unbekannte Testdaten in eine der vordefinierten Klassen einordnen.....	45
Abbildung 2.16: Vergleich der Vorgehensweise der Klassifizierung mittels Data Mining und Deep Learning. Bei den Data Mining Methoden ist eine manuelle Merkmalerstellung und Auswahl der Merkmale durch den Benutzer für die Modellbildung notwendig. Die Deep Learning Algorithmen extrahieren automatisch Merkmale, ohne Eingreifen des Benutzers und erstellen aus diesen ein Modell.	49
Abbildung 2.17: Schematische Darstellung der Trennung zweier Klassen A und B durch eine Hyperebene. Die Hyperebene wird durch die Stützvektoren beschrieben (modifiziert nach [161]).	60
Abbildung 2.18: Schematische Darstellung eines nicht linearen Zweiklassenproblems im 2D Raum und die Trennung der Daten unter Verwendung eines nicht linearen Kernels im 3D Raum (modifiziert nach [161]).....	61
Abbildung 2.19: Darstellung der Generalisierbarkeit und des Problems der Überanpassung eines Modells anhand der Abweichung von Trainings- und Testdaten in Abhängigkeit von der Modellkomplexität (modifiziert nach [165]).	62
Abbildung 5.1: Graphical Abstract Publikation I.....	87
Abbildung 5.2: Graphical Abstract Publikation II.	88
Abbildung 5.3: Graphical Abstract Publikation III.....	89

Tabellenverzeichnis

Tabelle 2.1: Mathematische Beschreibung der formbasierten Merkmale Aspektverhältnis, Kompaktheit, Konvexität, Zirkularität, Rundheit und Sphärizität [66],[69],[70],[72],[73].	23
Tabelle 2.2: Formel und Erklärung der Parameter Korrelation, Kontrast, Energie und Homogenität, die aus der GLCM berechnet werden können. N ist die Anzahl der Grauwerte im Bild, $P(i,j)$ die normierte Wahrscheinlichkeit von Pixelpaarungen mit den Grauwerten i und j , μ_x und μ_y sind die Mittelwerte jeder Zeile bzw. Spalte der GLCM und σ_x und σ_y ihre jeweilige Standardabweichung [76],[78],[79].	24
Tabelle 2.3: Symbole und Nomenklatur des ISIJ-Klassifizierungssystems (modifiziert nach [88]).	28
Tabelle 2.4: IWW-Klassifizierungssystem mit den Erweiterungen nach Thewlis et al. (modifiziert nach [89]).	29
Tabelle 2.5: Klassifizierungssystem nach Smirnov et al. für niedrigkohlige Linepipe-Stähle (modifiziert nach [90]).	30
Tabelle 2.6: Klassifizierungssystem für die kohlenstoffarme Phase nach Matrosov et al. für kohlenstoffarme niedriglegierte Stähle (modifiziert nach [91]).	31
Tabelle 2.7: Klassifizierungssystem für die kohlenstoffreiche Phase mit inselförmiger Struktur nach Matrosov et al. für kohlenstoffarme niedriglegierte Stähle (modifiziert nach [91]).	32
Tabelle 2.8: Übersicht über die Gefügebestandteile des Micro Quant Klassifizierungsschemas für Komplexphasenstähle (modifiziert nach [38]).	33
Tabelle 2.9: Micro Quant Klassifizierungsschema für die Matrixbestandteile von Komplexphasenstähle (modifiziert nach [38]).	34
Tabelle 2.10: Micro Quant Klassifizierungsschema für die Zweitphasebestandteile von Komplex-phasenstähle (modifiziert nach [38]).	35
Tabelle 2.11: Morphologien nach Ohmori et al. (modifiziert nach [92]).	36

Tabelle 2.12: Schematische Darstellung der unterschiedlichen Bainitmorphologien nach Reynolds et al. für die sechs verschiedenen Bainitarten (modifiziert nach [93],[94]).	38
Tabelle 2.13: Ferritmorphologien nach Krauss und Thompson (modifiziert nach [32]).	39
Tabelle 2.14: Generelle Struktur des Klassifizierungsschemas nach Gerdemann und Song (modifiziert nach [96],[97]).	41
Tabelle 2.15: Zusammenfassung von Publikationen im Bereich der Gefügeklassifizierung verschiedener Werkstoffe mittels Data Mining und Deep Learning Methoden.	56
Tabelle 2.16: Mathematische Beschreibung der Kennwerte Gesamtgenauigkeit, Genauigkeit, Sensitivität und κ , die aus der Konfusionsmatrix berechnet werden können um die Qualität eines Modells zu beurteilen [176],[177],[178],[179].	66
Tabelle 2.17: Einteilung des κ -Wertes nach Oritz et al. [176].	67