Neue Möglichkeiten der objektiven Graphitklassifizierung in Gusseisen durch Nano-Tomographie und internetbasierte Online-Verfahren

Dipl.-Ing. **A. Velichko**, Prof. Dr.-Ing. **F. Mücklich**, Universität des Saarlandes, Lehrstuhl Funktionswerkstoffe, Postfach 151150, D-66041 Saarbrücken

Kurzfassung

Gusseisen spielt eine wichtige Rolle als Konstruktionswerkstoff auch bei Hochleistungsanwendungen, wenn man in der Lage ist, die Ausbildung der Graphitmorphologie zu beherrschen. Dabei unterscheidet man nach DIN EN ISO 945 sechs Typen von Graphitausbildungen (Bild 1) die in Gusseisen vorkommen. Diese unterscheiden sich nicht nur in der Form und Anordnung der jeweiligen Graphiteinlagerungen voneinander, sie differieren auch grundlegend bezüglich ihrer mechanischen und physikalischen Eigenschaften. Da die traditionelle Begutachtung der Graphitmorphologie nach Richtreihenbildern nur qualitativ ist und einen breiten subjektiven Interpretationsspielraum zulässt, erfordern Entwicklung und Einsatz von "maßgeschneiderten" Gefügen im Gusseisen auch objektive und quantifizierbare automatische Klassifikationsverfahren.

Eine 2D-Formanalyse der Graphiteinschlüsse über die konventionellen Verfahren der quantitativen Gefügeanalyse ermöglicht die Auswahl der gefügecharakteristischen Parameter für die reproduzierbare Graphitklassifizierung. Mit Hilfe von 3D-Untersuchungen der realen Graphitmorphologie mittels FIB-Nanotomographie und der Simulation möglicher 2D-Schnitte konnten erstmals die objektiven Grenzen der bildanalytischen 2D-Klassifizierung beurteilt werden. Auf dieser Basis konnten auch diejenigen bildanalytischen Messgrößen ermittelt werden, die eine Klassifizierung der Graphitmorphologie optimieren können.

Auf dieser Basis wurde ein internetbasiertes Klassifizierungsverfahren entwickelt (www.materialography.net), das mit Hilfe des Stützvektorverfahrens diese Vielzahl bildanalytischer Messgrößen gleichzeitig in die Klassifizierung einbezieht und eine nachprüfbar hohe Klassifikationsgüte der komplexen Graphitteilchen in Gusseisen durch Angabe der Wahrscheinlichkeiten für die jeweilige Zuordnung gewährleistet.

Abstract

Cast iron can plays an important role as a construction material also for the high performance applications if we are able to precisely control the formation of the graphite morphology. Six types of graphite found in cast iron are differentiated according to DIN EN ISO 945 (Bild 1). These vary not only in shape and arrangement of graphite particles between each other, but they define primal mechanical and physical properties of cast iron. The traditional expertise of graphite morphology through comparing with the ideal standard images is only qualitative, and allows the wide range of subjective interpretations. Thus the new developments and applications of the precisely tailored cast iron microstructure demand the objective and quantitative automatic graphite characterization and classification.

The 2D shape analysis of graphite inclusions cover the conventional methods of quantitative image analysis and allows the selection of microstructural characteristic parameters for the reproducible graphite classification. But with the help of 3D investigations of the graphite morphology using FIB-Nanotomography it was possible for the first time to estimate, which limits exist by the 2D classification and to acquire optimized parameters, which improve the automatic classification of the graphite morphologies.

Based on the conducted experiments an internet based classification method was developed (<u>www.materialography.net</u>). It provides an automatic and reproducible classification of the complex objects (inlc. graphite particles) with the help of the support vector machine technology.

Einführung

Bei Gusseisenteilen in Hochleistungsanwendungen wie z.B. im Motorenbau rufen schon geringe Variationen in der Graphitausbildung deutliche Änderungen im Bauteilverhalten hervor. Daher ist die präzise quantitative Gefügecharakterisierung unverzichtbar. Eine quantitativ reproduzierbare Graphitklassifizierung von unterschiedlichen Graphitmorphologien kann die subjektiv verursachten Unklarheiten zwischen Gießerei und Anwender klären, um die gewünschten Gefüge und dadurch die gewünschten Eigenschaften zu erzielen.



Bild 1: Richtreihenbilder für die sechs Graphittypen nach DIN EN ISO 945

Stand der Technik sind subjektive Richtreihenvergleiche auf der Basis der beiden Industrienormen ASTM A 247-47 und DIN EN ISO 945 (Bild 1). Die empirischen, idealisierten Vergleichsbilder können allerdings nicht die Vielfalt der unterschiedlichen realen Graphitmorphologien widerspiegeln und lassen je nach Beurteiler einen breiten Spielraum für subjektive Beurteilung zu. Besonders gravierende Unterschiede konnten am Beispiel der Bewertung der Lamellengraphitanordnungen demonstriert werden (Bild 2).

Dadurch kann es immer wieder zu Differenzen zwischen Gussabnehmern und Gießereien kommen. Zusätzlich sind subjektive Richtreihenvergleiche sehr zeitaufwendig und im Hinblick auf die gewachsenen Anforderungen an die Eigenschaften und damit die Gefügepräzision von Gusseisen nicht mehr zu rechtfertigen.

Der Schwierigkeiten der empirischen Klassifizierung des jeweiligen Graphittyps sind auf seine irregulären, sehr komplexen und mehrheitlich nicht konvexen 3D-Formen zurückzuführen. Da aber für die Qualitätsprüfung nur die 2D-Schliffbilder vorliegen, die durch den zufälligen Schnitt der Graphitteilchen entstanden sind, ergeben sich daraus im Einzelfall uneindeutige Klassifizierungen.

Es ist offensichtlich, dass es bei den nicht konvexen Graphitvarianten immer 2D-Schnitte gibt, die man niemals eindeutig einer 3D-Variante zuordnen kann, insbesondere solche, die durch äußere Bereiche des Graphitteilchens verlaufen und dadurch nur sehr eingeschränkte Informationen über die tatsächliche Form enthalten oder gar in mehrere Einzelschnitte zerfallen, welche aber räumlich betrachtet zu einem einzigen Teilchen gehören.



Bild 2: Round Robin Test zur Graphitklassifizierung - Subjektive Klassifizierung der Lamellengraphitanordnungen von 120 ausgewählten Gefügebildern durch die Experten in vier verschiedenen Labors, die sich mit Gusseisen beschäftigen [1]. Während beispielsweise Labor 2 die Graphitausbildung überwiegend dem E-Graphit zuschrieb, war man in Labor 3 der Meinung, dass es sich um A- und D-Graphit handelt. Dies unterstreicht die Bedeutung einer objektiven und reproduzierbaren Klassifizierung.

Deshalb soll das Thema in drei Schritten behandelt werden:

- Definition der Ausgangssituation: d.h. konventionelle bildanalytische Messung einer statistisch gesicherten Formenvielfalt einer möglichst homogenen Graphitausbildung und deren Klassifikation auf der Basis des Standes des Wissens.
- 3D-Analyse der Graphitmorphologie: Bestimmung der möglichen Formenvielfalt und -wahrscheinlichkeit der 2D-Schnitte anhand ausgewählter realer 3D-Graphitteilchen mit Hilfe der FIB-Nanotomographie
- 3. **Optimierung der 2D-Klassifikation:** Untersuchung der für diese 2D-Schnittvielfalt wirkungsvollsten bildanalytischen Messgrößen zur Optimierung der 2D-Klassifikation

Ausgangssituation: konventionelle Analyse der 2D-Schliffbilder

Zur statistischen Absicherung der Ausgangssituation erfolgte als erstes die 2D-Analyse einer hinreichend großen Anzahl von Graphitteilchen jedes einzelnen Typs. Dazu wurden möglichst homogene Gusseisenproben mit ausschließlich Lamellen- (I), oder Vermikular- (III), oder Kugelgraphit (VI), sowie Temperkohle (VI-V) verwendet. Nach Auswertung der Literatur zur bildanalytischen Klassifizierung komplex geformter isolierter Partikel wurden aus der großen Vielfalt der teilchenbezogenen bildanalytischen Messgrößen [5] zwei Formparameter ausgewählt, die eine hohe Klassifizierungsgüte ermöglichen, das sind Rundheit und Kompaktheit. Diese zwei Formparameter vergleichen die 2D-Teilchenform mit einem idealen Kreis und werden nach folgenden Formeln berechnet:

$$Rundheit = \frac{4 \cdot A}{\pi \cdot (MaxFeret)^2}$$
(1)

$$Kompaktheit = \frac{4\pi \cdot A}{(ConvexP)^2}$$
(2)

(A - Teilchenfläche, MaxFeret – maximaler Feret-Durchmesser, ConvexP – konvexer Umfang der 2D-Partikel).

Da für die unterschiedlichen Graphittypen die Formparameter zusätzlich von der Teilchengröße abhängen (z.B. Kompaktheit, siehe Bild 5a), wurde ein Größenparameter – der maximale Feret-Durchmesser – bei dieser Graphitklassifizierung berücksichtigt.

Die Ergebnisse dieser Untersuchungen wurden für die Erstellung eines bildanalytischen Klassifikators genutzt [2]. Die automatische Klassifizierung liefert neben der graphischen Darstellung (Bild 3) einen vollständigen Datensatz aller analysierten Graphitteilchen.



Bild 3: Ergebnisse der Klassifizierung eines Gusseisen-Gefüges mit unterschiedlichen Graphitmorphologien mit Hilfe der Parameter Rundheit und Kompaktheit [2]

Analyse der 3D-Graphitstrukturen

Wenn wir uns bewusst machen, dass die Unsicherheiten in der 2D-Klassifikation von der (bisher unbekannten) 3D-Komplexität herrühren, dann ist es folgerichtig, die 3D-Gestalt der unterschiedlichen Graphitmorphologien zu untersuchen. Dafür sind tomographische Verfahren bekanntermaßen prädestiniert. Insbesondere die neue FIB-Nanotomographie, bei der ein rasternder fokussierter Ionenstrahl (Focused Ion Beam - FIB) für eine Serienschnittechnik in Nanometerdimensionen (minimaler Schnittabstand z.B. 10nm) eingesetzt wird und ein rasternder Elektronenstrahl (REM) für die Abbildung sorgt (Auflösung z.B. 3nm) ergibt eine 3D-Auflösung der FIB-Nanotomographie bis zu 3x3x10 nm³. Entscheidend für die Realisierung einer Tomographie von kompletten Graphitteilchen ist andererseits das größte zu untersuchende Volumen, dass im wesentlichen vom Abtragsvermögen des Ionenstrahles abhängt und mit ca. 100x100x100 µm³ angegeben werden kann. Bemerkenswert an dieser neuen Tomographievariante ist, dass durch Einsatz des Elektronenstrahls zur Abbildung auch alle bekannten Kontrastierungsvarianten des Rasterelektronenmikroskops (Sekundärelektronen, Rückstreuelektronen, Röntgenstrahlen – EDX und Braggstreuung rückgestreuter Elektronen - EBSD) verfügbar sind und im Rahmen der Auflösung eine quasi vollständige chemische und strukturelle 3D-Aufklärung des Tomographievolumens möglich ist.

Damit wurde zum ersten Mal die Beurteilung der 3D-Form von unterschiedlichen Graphiteinschlüssen möglich [3]. Im Bild 4 sind die rekonstruierten 3D-Formen der einzelnen Graphitvarianten zu sehen. Durch die genaue Beurteilung der Graphitteilchengestalt und seiner inneren Struktur, inklusive der Information über die chemische Zusammensetzung der Keime, wurden neue Erkenntnisse über die Teilchenbildung und deren Wachstumsmechanismen gewonnen [3].



Bild 4: Ergebnisse der FIB –Tomographie, 3D rekonstruierte Aufnahmen von a) Kugel-, b) Temper-, c) Vermikular- und d) Lamellengraphit [3, 4]

3D-Analyse der Graphitmorphologie

Alle Graphitteilchen wurden mit Hilfe der 3D-Charakterisierungssoftware MAVI quantifiziert. Die Software wurde auf der Basis der [5] beschriebenen Algorithmen konzipiert. Die gefügecharakteristischen Grundparameter spezifisches Volumen (V), spezifische Oberfläche (S), Integral der mittleren (M) und Integral der totalen Krümmung (K) der Graphitphase wurden für alle Teilchen des jeweiligen Graphittyps ermittelt.

Die Ergebnisse sind in Tabelle 1 zusammengefasst. Die Kombination der oben genannten 3D-Parameter mit den daraus berechneten 3D-Formparametern f_1 und f_2 beschreibt ein komplexes Graphitpartikel eindeutig. Eine stark zerklüftete Oberfläche des Kugelgraphitteilchens (GJS1) hängt mit einem großem Wert für die spezifische Oberfläche (S), stark negativen Werten für die Integrale der mittleren (M) sowie der totalen Krümmung (K) zusammen [4]. Demgegenüber nähert sich das relativ glatte Kugelgraphitteilchen (GJS2) am stärksten der idealen Kugel an. Der Eulerzahl ist ein Maß für die Dispersität und weicht von der Teilchenzahl durch die Berücksichtigung der inneren Grenzflächen der Teilchen ("Poren" in Graphitteilchen) ab. Der Parameter K beschreibt zusammen mit der Eulerzahl sehr umfassend die Gestalt und Konnektivität der Teilchen im Volumen und kann nur aus der 3D-Aufnahme berechnet werden.

	GJS1	GJS2	GJM	GJV	
2D Schnitt					
3D Ansicht					
V, µm³	8722	9912	78130	81324	
S, μm²	6520	2970	34885	44594	
M, µm	-2892	-493	102	2297	
K	-1470	264	-980	-390	
χ	-117	21	-78	-31	
$f_1 = \sqrt{36\pi} \frac{V}{\sqrt{S^3}}$	0,176	0,651	0,128	0,092	
$f_2 = \frac{V}{V_{Konvexehiille}}$	0,46	0,69	0,30	0,12	

Tabelle 1: 3D-Teilchenparameter für Kugel-, Temper- und Vermikulargraphit [4]

Aus der 3D-Analyse sind deutlich die Unterschiede zwischen den jeweiligen Graphittypen zu erkennen. Auch unterschiedliche Lamellengraphitanordnungen können objektiv quantifiziert werden [4]. Beispielsweise ist der Volumenanteil des D-Lamellengraphit etwas kleiner, jedoch besitzt D-Graphit einen etwa doppelt so großen Wert der spezifischen Grenzfläche S wie die Lamellengraphitanordnung B (Tabelle 2). Für die Integrale der mittleren und totalen Krümmung ergibt sich für D-Graphit ein zehnfach höherer Wert als für B-Graphit. Dadurch dass in den 2D-Schnitten fast alle Teilchen separat voneinander liegen, gleichen sich die Werte für die Teilchenzahl (N_A) und die 2D-Eulerzahl (χ_A) sehr. Bei der 3D-Analyse wird zusätzlich die räumliche Konnektivität der Lamellengraphitteilchen berücksichtigt. Als Ergebnis ist die Teilchendichte sehr niedrig. Die Spezifische Eulerzahl im Volumen (χ_V) ist deshalb für die Charakterisierung solcher Gefüge deutlich besser geeignet.

			Lamellengraphit IB	Lamellengraphit ID		
Parameter	Dimension	Einheit	de la constante de			
Vv	2D/3D	%	13,16	9,77		
Sv	2D/3D	1/µm	0,1954	0,4446		
M_V	2D/3D	1/µm²	0,0174	0,3215		
Kv	3D	1/µm³	-0,0161	-0,261		
XA	2D	1/µm²	0,0022 ± 0,0008	$0,024 \pm 0,002$		
N _A	2D	1/µm²	0,0024 ± 0,0007	$0,024 \pm 0,002$		
Xv	3D	1/µm³	-1,28·10 ⁻³	-2,07·10 ⁻²		
N_V	3D	1/µm³	9,4·10 ⁻⁵	4,9·10 ⁻³		

Tabelle 2: Messfeldbasierte Parameter für Lamellengraphit aus 2D- und 3D-Analyse

<u>Volumenspez.</u> Messgrößen: spez. Volumen (V_V), spez. Grenzfläche (S_V), Integral der mittl. Krümmung (M_V), Integral der totalen Krümmung (K_V), Teilchenzahl (N_V), Eulerzahl (χ_V) <u>Flächenspez.</u> Messgrößen: Teilchenzahl (N_A), Eulerzahl (χ_A)

Analyse der 2D-Schnitte durch die 3D-Graphitteilchen

Nach der 3D-Rekonstruktion jeweils repräsentativer Graphitteilchen wurde durch diese Voxel-Gebilde im Computer als Computersimulation eine möglichst große Zahl zufällig positionierter und zufällig orientierter ebener Schnitte gelegt und die Häufigkeit und Form der einzelnen Schnittformen analysiert. Alle teilchenbasierten Messgrößen inklusive derer, die für die 2D-Klassifizierung relevant sind, wie Rundheit, Kompaktheit und MaxFeret, wurden bestimmt. Einige Beispiele der Ergebnisse aus diesen 2D-Schnitten durch die 3D-Teilchen sind im Bild 5b als Kompaktheit vs. MaxFeret aufgetragen. Für den analysierten Teilchengrößenbereich zwischen 0 und 80 µm ist eine eindeutige Übereinstimmung der Ergebnisse aus der konventionellen 2D-Analyse und den 3D-Rekonstruktionen festzustellen. Es ist deutlich zu sehen, dass mit Hilfe der gewählten Messgrößen für die 2D-Klassifizierung die eindeutige Unterscheidung auch der 2D-Schnitte durch die 3D-Teilchen von Lamellen-, Vermikular- und Kugelgraphit durchgeführt werden kann. Die 2D-Schnitte durch die Temperkohle haben eine etwas größere Streuung der Formparameter Rundheit und Kompaktheit. Als Ergebnis werden manche von diesen 2D-Schnitten nach dem konventionellen 2D-Klassifizierungsschema falsch zugeordnet (siehe Bild 6). Die großen 2D-Schnitte durch die Teilchenmitte werden wegen ihrer eher kompakten Form als Kugelgraphit (Flächenanteil 21%) identifiziert. Demgegenüber werden die kleinen 2D-Schnitte am Teilchenrand fälschlicherweise dem Vermikulargraphit (8%) zugeordnet. Als Graphittyp IV-V werden korrekt nur noch 71 % des Flächenanteils aller 2D-Schnitte klassifiziert.



Bild 5: Form-Größe-Abhängigkeit für Graphitteilchen a) aus 2D-Analyse [2] und b) aus 3D-Analyse [3].



Bild 6: Ergebnisse der Klassifizierung der 2D-Schnitte durch ein rekonstruiertes Temperkohleteilchen [3]. Die äußeren kleinen Schnitte enthalten keine eindeutigen Forminformationen mehr (Erläuterungen im Text)

Es zeigt sich eindeutig, dass bei kleineren 2D-Schnitten, die durch das Schneiden der 3D-Graphitpartikel an deren äußerem Rand entstanden sind, die Werte der Formparameter für die unterschiedlichen Graphittypen sehr stark überlappen. Das heißt, dass für den größten Teil der 2D-Schnitte, (etwa diejenigen, die kleiner als 20% der wahren Teilchengröße sind), sinnvollerweise keine eindeutige Zuordnung zu einer bestimmten Graphitmorphologie gemacht werden sollte. Der Flächenanteil solcher Schnitte beträgt je nach Graphittyp (5-10) %. Bei einem Volumenanteil des Graphits in der Gusseisenprobe von 10 %, bedeutet dies (0,5–1) %. Mit diesem Fehler muss bei der Klassifizierung 2D-Schnitte also prinzipiell gerechnet werden.

Die 3D-Charakterisierung der komplexen Graphitteilchen hat außerdem gezeigt, dass die zusätzliche Messung z. B. der Eulerzahl (die in 2D auch die "Poren" in Graphit beschreibt und der Konvexität die existierende 2D-Klassifzierung wesentlich verbessern kann.

Internetbasierte automatische online Klassifizierung

Die Ergebnisse der Untersuchungen zur Klassifizierung der Graphitmorphologien wurden für ein online verfügbares Charakterisierungs- und Klassifizierungssystem zu Grunde gelegt. Durch die Zusammenarbeit mit dem Max-Plank-Institut für Informatik (Prof. Weikum) in Saarbrücken ist die Freeware für die Klassifizierung komplexer Graphitformen mit Hilfe des Stützvektorverfahrens [6] konzipiert worden.

Stützvektorverfahren und Klassifizierungsparameter

Das Stützvektorverfahren (SVM) benutzt eine große Anzahl (*m*) von bildanalytischen Messgrößen gleichzeitig für die automatische Kategorisierung der Graphitteilchen. Prinzipiell werden diese *m* Merkmale genutzt, um jedes Teilchen in einem *m*-dimensionalen Raum zu positionieren. Die lokale Anhäufung von Teilchen in diesem *m*-dimensionalen Raum aufgrund ihrer Ähnlichkeit ist dann die Basis für die Kategorisierung, auch wenn diese Anhäufungen nicht vollständig isoliert sind und sich (teilweise) überlappen. Das Stützvektorverfahren rechnet diejenigen optimalen *n*-dimensionalen Hyperebenen aus, die die einzelnen lokalen Anhäufungen der Teilchen trennen, so dass

- einerseits möglichst viele der zu der Anhäufung <u>gehörenden</u> Teilchen erfasst werden (in Bild 7 die (+) Teilchen – sog. "recall" im Data Mining) und
- andererseits möglichst wenige der zu der Anhäufung <u>nicht gehörenden</u> Teilchen ausgeschlossen werden (in Bild 7 die (-) Teilchen – sog. "precision" im Data Mining)
- Durch die so genannte weiche Trennung (δ) mit Vermessung des Abstandes jedes Teilchens zur Hyperebene können zusätzlich die <u>Wahrscheinlichkeiten</u> berechnet werden mit denen ein Teilchen zu den einzelnen Klassen gehört (siehe auch Bild 9).

Grundlage dieser rein empirischen Klassifizierungsstrategie ist neben dem Wissen um die mutmaßlich relevanten bildanalytischen Messgrößen ein ausreichend großer Trainingsdatensatz, der in unserem Falle anhand der eingangs analysierten 2D-Schnitte zur Verfügung stand.



Bild 7: Positionierung der Teilchen anhand von *m* Merkmalen im *m*-dimensionalen Raum. Durch die Berechnung einer trennenden Hyperebene im *m*-dimensionalen Raum erfolgt die Klassifizierung anhand von Trainingsdaten (Erläuterungen siehe Text).

Insgesamt 15 gefügecharakteristische Messgrößen (siehe Bild 8 unter "Features") wurden in das Stützvektorverfahren einbezogen. Die einzelnen Formparameter wurden aus den Grundparametern berechnet und zusammen mit der Richtzahl (Teilchengröße nach DIN EN ISO 945) und der Vergrößerung (Pixelgröße) als Klassifikationsparameter verwendet.

Sensitivitätsanalyse und Klassifizierungsgüte

Der Prototyp der Web-Anwendung, *POCA (siehe <u>www.materialography.net</u>)*, ist im Rahmen einer Masterarbeit [6] entstanden (siehe Bild 8a). Die Gefügebilder können über ein Webinterface geladen, analysiert und klassifiziert werden.

Die Klassifizierung erfolgt anhand der Modelle (d.h. in unserem Falle der Lage der Hyperebenen im 15-dimensionalen Raum der benutzten Messgrößen), die mit Hilfe der Trainingsbilder positioniert worden sind [6].



Home Start a new Training Start a new Classification Feature-Description

Name	Features	Classes	Sensitivity	Kernel	Parameter	Errors Warnings	
Default roundenss circularity sphericity fractal_dimension compactness excursion_ration elliptic_area_shape convexity convexityF eulernumber rectmeasure elliptic_area_shape_2 pixelsize size_class aspect_ratio	roundenss circularity sphericity fractal_dimension	Type I Type III Type IV/V Type VI	Result of the factorial analysis Factor 1 (accounts for 6	Default (RBF) 50.78843882016	gamma=0.125 C=128.0		
		roundness circularity sphericity fractal_dimension compactness excursion_ratio elliptic_area_shape convexity convexity convexity eulernumber rectmeasure elliptic_area_shape pixelsize size_class aspect_ratio	_2 2	0,926 0,951 0,216 0,443 0,683 0,693 0,695 0,695 0,692 0,692			

Bild 8: a) POCA Webinterface und Zugang für Klassifizierung, Training und Übersicht der existierende Modelle. b) Modell für die Klassifizierung der Graphitmorphologie (vom Webinterface angebotenes Standardmodell).

Zur Bewertung der Klassifikationsgüte wurden homogene Trainingsbilder verwendet. Klassifiziert wurden mehr als 1000 Teilchen je Klasse mit unterschiedlichen Modellen und Klassifikationsparametern. Auf diese Weise gelingt die quantitative Beurteilung der Klassifikationsgüte (*Precision* und *Recall*) für unterschiedliche schon vorhandene Modelle. Die Arbeit hat gezeigt, dass eine Klassifikation anhand des Stützvektorverfahrens sehr gute Ergebnisse erzielt. Für die vorliegenden Testdaten ließ sich eine hohe Klassifikationsgüte von ca. 95 % erreichen.

Entscheidendes Ziel dieser Arbeit war neben der möglichst korrekten Klassifikation auch eine Einschätzung, welche der verwendeten 15 Merkmale der Teilchen besonders aussagekräftig für die Graphitklassifikation sind. Parameter, die sich im jeweiligen Modell durch die Sensitivitäts- und Faktorenanalyse als besonders wichtig erwiesen haben sind fett gedruckt (Bild 8b).

Ergebnisse der online Analyse

Das Web-Interface von POCA bietet neben Klassifikation und Training auch die Möglichkeit, eine globale Analyse über alle Parameter und Teilchen eines Typs durchzuführen. Auf Übersichtsseiten werden dem Benutzer die Eigenschaften der Klassifizierungs-Modelle und der verwendeten Messparameter erläutert. Der interessierte Anwender sei aber auf das Benutzerhandbuch verwiesen, das ebenfalls über die Webseite <u>www.materialography.net</u> erreichbar ist.

Die Startseite von POCA (Bild 8a) bietet neben Links zu Klassifikation und Training im unteren Teil auch die globale Featureanalyse an. Hier kann für Teilchen einer bestimmten Richtzahl und für Bilder einer bestimmten Pixelgröße eine Auswertung der einzelnen Parameter vorgenommen werden (Minimum, Maximum, Mittelwert und Standardabweichung). Die vom Nutzer hochgeladenen Bilder werden anhand der erstellten Modelle klassifiziert. Bezüglich der Darstellung kann ausgewählt werden, ob das Ergebnis graphisch und mit Details für alle Teilchen präsentiert werden soll (vgl. Bild 9). Ansonsten erhält der Benutzer nur eine textuelle Information, wie viel Prozent von jedem Graphittyp in dem Bild enthalten sind. Ergänzend kann in beiden Fällen eine Übersicht über alle Teilchen und deren Parameter im Excelkompatiblen Format heruntergeladen werden. In dieser Übersicht wird auch sichtbar, mit welcher Wahrscheinlichkeit anhand von welchen gefügecharakteristischen Parametern die Teilchen zum jeweiligen Graphittyp zugeordnet wurden (Bild 9).



Bild 9: Ergebnisse der online Klassifizierung mit dem Stützvektorverfahren

Der entstandene Prototyp der Anwendung POCA ist so gestaltet, dass damit einfach analysiert und auch experimentiert werden kann. So können Klassifikationsparameter bei Training und/oder Klassifikation weggelassen oder die SVM-Einstellungen verändert werden.

Zusammenfassung

Die Klassifizierung der Graphitmorphologie mit herkömmlichen bildanalytischen Verfahren hat Unsicherheiten, die bei nichtkonvexen Graphitvarianten von der Uneindeutigkeit der Zuordnung der Formen der Schnittflächen herrühren. Es wurde gezeigt, dass mit diesen Verfahren eine (über alle Graphitvarianten gemittelte) Klassifizierungsgüte von max. 90% nicht überschritten werden kann.

Die erstmalige Untersuchung der 3D-Gestalt der einzelnen Graphitvarianten mit Hilfe der FIB-Nanotomographie ermöglichte es, die signifikanten Unterschiede anhand von Grundparametern und auch teilchenbezogenen Parametern zu analysieren.

Außerdem konnten anhand von Simulationen zufälliger Schnittflächen durch diese rekonstruierten 3D-Formen die Grenzen der 2D-Analyse aufgezeigt werden. Es ergab sich insbesondere, dass Schnittflächen mit Durchmessern kleiner als ca. 20% derer des 3D-Teilchens kaum noch eindeutig klassifizierbare Schnittformen aufweisen.

Bei der Untersuchung der relevanten Messgrößen ergab sich, dass neben den bildanalytischen Größen Kompaktheit und Rundheit insbesondere die Eulerzahl bei den nichtkonvexen Graphitvarianten aussagekräftig ist, im übrigen aber stets eine Verknüpfung mehrerer Messparameter vorgenommen werden muss, um für alle Graphitvarianten ein optimales Klassifizierungsergebnis zu erzielen.

Aus diesem Grunde wurden mit Hilfe des Stützvektorverfahrens 15 solcher relevanten Messgrößen gleichzeitig in die Klassifizierungsstrategie einbezogen. Bei der Analyse von Sensitivität und Klassifizierungsgüte bestätigte sich, dass für unterschiedliche Graphitformen unterschiedliche Messparameter die entscheidende Rolle spielen, so dass das Stützvektorverfahren als Basis für ein neues online-Verfahren gewählt wurde, dass es ermöglicht, unter Nutzung vorhandener Trainingsdaten oder unter Generierung eigener Trainingsdaten eine sehr zuverlässige Klassifizierungsgüte für die meisten Graphitvarianten von mehr als 95% zu realisieren.

Danksagung

Die Autoren danken den Projektpartnern und deren Arbeitsgruppen H. Junk, Halberg Guss GmbH, R. Heinemann, VW AG und I. Altpeter, IZFP für die produktive Zusammenarbeit im Rahmen des BMBF-Projekts 03N3119; sowie bei G. Weikum, Max-Plank-Institut für Informatik für die großartige Zusammenarbeit bei der Entwicklung der POCA Freeware. Nicht zuletzt sei C. Holzapfel für die Hilfe bei den FIB-Untersuchungen und bei K. Schladitz, Fraunhofer ITWM, für die Unterstützung bei der 3D-Analyse herzlich gedankt.

Literatur

- Ohser, J., Sandau, K., Stets, W., Gerber, W. Bildanalytische Charakterisierung von Graphit im Grauguss und Klassifikation der Lamellenanordnung, Practical Metallography, 2003, S. 454-473
- [2] Velichko, A., Mücklich, F., Bildanalytische Formanalyse und Klassifizierung der irregulären Graphitmorphologie in Gusseisen, Practical Metallography 43,2006, 192-207
- [3] Velichko, A., Holzapfel, C., Mücklich, F., 3D characterization of graphite morphologies in cast iron, Advanced Engineering Materials 1/2007 (in print)
- [4] Velichko, A., Schladitz, K., Holzapfel, C., Mücklich, F., 3D-Charakterisierung der Graphitmorphologie mit Hilfe der FIB-Nanotomographie, Prakt. Met. Sonderband 38 (2006), 169-176
- [5] Ohser, J., Mücklich, F., Statistical Analysis of Microstructures in Materials Science, John Wiley & Sons, 2000
- [6] Richter, C., Klassifikation von Werkstoffgefügebildern aufgrund teilchenbasierter Kenngrößen, Fachbereich Informatik, Masterarbeit, 2005, Universität des Saarlandes