HOKKAIDO UNIVERSITY

Title	マルチスケール計算におけるフェーズフィールド組織の再現性の定量的評価［論文内容及び審査の要旨］
Author(s)	伊勢谷, 健司
Degree Grantor	北海道大学
Degree Name	博士(工学)
Dissertation Number	甲第11615号
Issue Date	2014-12-25
Doc URL	https://hdl.handle.net/2115/57719
Rights(URL)	https://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/2.1/jp/
Type	doctoral thesis
File Information	Kenji_Iseya_abstract.pdf, 論文内容の要旨

Hokkaido University Collection of Scholarly and Academic Papers : HUSCAP

学　位　論　文　内　容　の　要　旨

博士の専攻分野の名称　　博士（工学）　　氏名　伊勢谷 健司

学　位　論　文　題　名

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

フェーズフィールド法 (Phase Field Method; PFM) は合金組織の時間発展過程を扱う強力な手法として広く知られている。近年、PFM は組織計算に留まらず有限要素法などの他の数値計算手法と組み合わせることで機械的/機能的性質までをも評価し得るものとなっている。このようなマルチスケール計算は通常、大規模計算によって空間・時間をスケールアップしていくことで達成されると考えられる。とりわけ、近年の計算機性能の向上により扱える空間メッシュの数が飛躍的に増加したことで、大きなスケールの現象を小さなスケールの現象の協力現象として予測することも可能となってきた。しかし、異なる空間スケールをつなぐためには何らかの平均化操作が必須となる。統計力学においてはこの過程は粗視化として知られるが、スケールの変化に対して分配関数が不変という粗視化の厳密な条件は実際の合金における組織形成の複雑な過程に対して適用するのは非常に困難である。そのため、移動平均法等の実際的な平均化操作が代替として用いられてきたが、この平均化の際にはあるスケールにおける詳細な情報が失われていき、そこで本質的な情報が失われてしまうとマルチスケール計算を行なっても満足な結果を得られないという問題がある。また、生成された画像を定量的に評価することは容易ではなく、平均化前後で内部組織の特徴がどの程度保持されているかを評価する方法は確立されていない。この観点から、PFM により生成した組織画像の再現性について、ベイズ統計に基づく画像評価法およびスペクトル解析を利用した解析手法の系統的な研究を行った。

具体的な研究手順は以下の通りである。PFM を用いて規則-不規則変態の組織発展過程を計算した。得られた組織に対して $l \times l$ (l = 1,3, 5, …, 51) の平均化領域サイズ毎の移動平均操作、および分散 σ^2 (σ^2 = 0.0〜200.0) のガウシアンフィルタ操作を行った。その後、各組織画像に対して二次元フーリエ変換を行い、パワースペクトルを得た。組織の再現性を評価するパラメーター R、R_2 および平均化前後のパワースペクトルを比較することにより、平均化操作による組織画像の特徴の変化を評価した。ここで、R と R_2 はそれぞれ内部組織の長距離規則度 η の空間分布の平均化操作前後での変化量と、η の空間勾配の変化量を示すパラメーターである。

PFM により得られた組織に対して平均化操作を行うと、(i) 平均化領域サイズよりも小さなサイズの規則ドメインが潰れる、(ii) 規則ドメイン間の境界が消える、といった組織の形態変化が起こることが確認された。R、R_2 の変化挙動は、上述の形態変化に対応するものであった。また、スペクトル解析を行った結果、平均規則ドメイン間隔や不規則相の周期性といった組織の特徴に対応するピークが平均化操作により失われることで組織画像に大きいな変化が起こることが確認された。以上のようにして、パラメーター R、R_2 およびパワースペクトルを用いることで平均化操作による組織画像の変化を定量的に評価することができた。