



HOKKAIDO UNIVERSITY

Title	データ同化に基づく金属の凝固シミュレーションのパラメータ推定 [論文内容及び審査の要旨]
Author(s)	岡, ゆきみ
Degree Grantor	北海道大学
Degree Name	博士(工学)
Dissertation Number	甲第14431号
Issue Date	2021-03-25
Doc URL	https://hdl.handle.net/2115/81320
Rights(URL)	https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/
Type	doctoral thesis
File Information	Yukimi_Oka_abstract.pdf, 論文内容の要旨



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 岡 ゆきみ

学 位 論 文 題 名

データ同化に基づく金属の凝固シミュレーションのパラメータ推定

(Parameter estimation for simulations of solidification in metals based on data assimilation)

計算機による金属の凝固シミュレーションは、凝固過程の理解および予測のために有効な手段である。そのため、現在、解析対象に応じた様々なシミュレーション・モデルが提案され、実際に材料開発の場で活用されている。しかし、未知の材料や新規のプロセスを対象とする場合、入力パラメータの値の欠如が多く、シミュレーションで共通の問題となっている。

本研究では、凝固シミュレーションの方法として、メゾスケールのフェーズフィールド法とマクロスケールの凝固伝熱解析のそれぞれに着目した。フェーズフィールド法はデンドライトなどの凝固組織の形成を予測する非常に強力な手法であり、現在様々なプロセスや合金系に適用されている。ただし、この計算には固液界面物性値を入力する必要があるが、全ての固液界面物性値を求めることは実験的に極めて困難である。また、原子シミュレーションを用いたとしても様々なアプローチを組み合わせた非常に煩雑な解析が必要である。さらには、本来フェーズフィールド法の計算に必要な過冷状態の固液界面物性値を算出する方法は開発されていない。このような理由により、全ての固液界面物性値が報告されている金属はむしろ非常に限定されており、フェーズフィールド法の適用範囲が限定される大きな原因となっている。一方、凝固伝熱解析は製品レベルの鋳型や鋳物を対象としたマクロスケールの手法であり、鋳型内で溶湯がどのように凝固するかを予測するために活用されている。このとき、鋳型-溶湯間の熱伝達係数に如何に適切な値を設定するかが大きな問題となっている。熱伝達係数を決定する様々な方法が発展してきたが、それらは精度が不十分であったり、限定された条件にのみ適用可能であったり、問題点が多いのが現状である。

本研究ではデータ科学の手法であるデータ同化を凝固シミュレーションに応用し、拡張性と簡便さを兼備した高精度な入力パラメータの推定方法の構築を試みた。データ同化はシミュレーションに観測データを取り入れることでシミュレーションを修正し、システムの状態やパラメータを推定する方法である。本論文は全 6 章から構成されている。その内容を以下に説明する。

第 1 章では、凝固シミュレーションの重要性と入力パラメータの決定に関する既存の問題を指摘した。そして、データ同化の概要について説明した。

第 2 章では、本研究で用いたデータ同化の手法の粒子フィルタとアンサンブルカルマンフィルタのアルゴリズムを説明した。また、等温凝固におけるミクロスケールの凝固組織の発展を対象としたフェーズフィールド法と、鋳造を対象とした凝固伝熱解析のモデルについて説明した。

第 3 章では、固液界面物性値の推定に対する粒子フィルタの有効性を双子実験によって検証し、固液界面物性値を高精度に推定する方法を開発した。特に本研究では観測データとして分子動力学法の組織変化のデータを用いることで、メゾ・ミクロスケールの新しい相補的アプローチの開発に取り組んだ。まず双子実験では、分子動力学法から得られる観測データの代わりに、それを模擬するフェーズフィールド法の結果を観測データとして推定を行った。その結果、全ての固液界面物性値を同時に推定した場合、界面カイネティック係数の平均値と異方性パラメータを高精度に推定可

能であり、推定条件を変更しても同様の精度で推定できることが明らかとなった。そこで、界面カイネティック係数の平均値と異方性パラメータの推定結果を得た後、固液界面エネルギーの平均値と異方性パラメータを推定することで、推定精度を向上させる新しい方法を考案した。本研究ではこの方法を多段階推定と呼び、様々な条件でその有効性を検証した。格子点間隔やシステムサイズが異なる場合にも、多段階推定によって全ての固液界面物性値を推定可能であることが示された。多段階推定では単一の分子動力学法の結果から全ての固液界面物性値を推定可能であり、また、過冷状態における固液界面物性値を推定することができた。これは従来の方法にはない本アプローチの利点である。

第4章では、第3章で開発した粒子フィルタの多段階推定法によって、実際に分子動力学法で得られた観測データから過冷状態の固液界面物性値を推定した。純 Al の過冷凝固を対象にパラメータ推定を行った結果、界面カイネティック係数の平均値は $4.5 \times 10^{-3} \text{ sm}^{-1}$ 、界面カイネティック係数の異方性パラメータは 0.69、固液界面エネルギーの平均値は 0.18 Jm^{-2} 、固液界面エネルギーの異方性パラメータ ε_1 は 0.007、 ε_2 は -0.0027 と求まった。また、これらの推定値を用いてフェーズフィールド法による凝固シミュレーションを行った結果、分子動力学法の結果と良い一致を示した。つまり粒子フィルタの多段階推定法によって全ての固液界面物性値が推定可能であった。本アプローチでは、単一の分子動力学法の結果のみから全ての固液界面物性値の推定が可能である。さらには、過冷状態の固液界面物性値を推定できるという特長は、他の固液界面物性値の決定方法にはない利点である。

第5章では、粒子フィルタとアンサンブルカルマンフィルタに基づく凝固伝熱解析のパラメータ推定を行った。まず、合金の金型鋳造を対象として、鋳型-溶湯間の熱伝達係数と溶湯の熱伝導率の推定に対するデータ同化の有効性を検証した。その結果、アンサンブルカルマンフィルタによって鋳型-溶湯間の熱伝達係数と溶湯の熱伝導率を同時に推定可能であることが示された。このとき、熱伝達係数の時間変化は、事前に近似式を仮定することなく自動的に推定可能であった。次に、対象を炭素鋼の連続鋳造に拡張し、実際に測定された温度から粒子フィルタによって鋳型-溶湯間の熱伝達係数を推定した。その結果、鋳型から得られた冷却曲線のみから時間変化する熱伝達係数を自動的に推定することができた。また、推定された熱伝達係数を用いた伝熱解析によって、実際に測定された温度変化を再現することができた。

第6章では本論文を総括した。