



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_review.pdf, 審査の要旨



学位論文審査の要旨

博士の専攻分野の名称 博士 (工学) 氏名 岡 ゆきみ

審査担当者 主 査 教 授 大野 宗一

副 査 教 授 三浦 誠司

副 査 教 授 橋本 直幸

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、凝固過程の理解と予測のために有効な手段である。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が欠如していることが、多くのシミュレーションで問題となっている。本研究では、凝固シミュレーションの方法として、メソ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手法であり、入力パラメータとして必要な固液界面物性値は主に分子動力学法で算出されている。しかし、固液界面物性値の算出には複数の煩雑な解析が必要であり、全ての固液界面物性値が報告されている金属は非常に限られている。更に、過冷状態の固液界面物性値の算出方法は開発されていない。以上のような問題によってフェーズフィールド法の適用範囲が限定されている。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。

本研究は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ものである。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データ科学の手法である。本論文は全6章から構成されており、各章の概要は以下の通りである。

第1章では、凝固シミュレーションの重要性を述べている。そして、入力パラメータの決定に関する既存の問題を指摘し、データ同化の概要を説明している。

第2章では、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ている。また、フェーズフィールド法と凝固伝熱解析のモデルについて説明している。

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ている。固液界面物性値の推定では観測データとして分子動力学法による組織変化のデータを用いることを想定するが、双子実験ではそのデータ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代わりに用いる。双子実験において、全ての固液界面物性値を同時推定した場合、固液界面物性値の種類によって推定の容易さが異なることが明らかになった。その中で、界面移動度の推定は比較的容易であり、それを一旦決定した後に、残りの固液界面物性値のみを対象に推定すると、全ての物性値を精度良く推定できることが明らかとなった。そこで、本研究ではこのように推定が容易な固液界面物性値から順に決定する多段階推定法を開発した。多段階推定法によって、単一の分子動力学

法の結果から全ての固液界面物性値が推定可能になった。特に、本手法は過冷状態の物性値を推定可能という、従来の方法にはない特長を持つ。

第4章では、粒子フィルタに基づく多段階推定法によって、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ている。純 AI の全ての固液界面物性値が粒子フィルタに基づく多段階推定によって推定された。また、推定結果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は、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に基づく多段階推定法によって、単一の分子動力学法の結果のみから、過冷状態の全ての固液界面物性値が推定可能であることが示された。

第5章では、凝固伝熱解析のパラメータ推定に対するデータ同化の有効性を検証し、実際に推定を行っている。まず、合金の金型鋳造を対象とし、双子実験によって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。また、熱伝達係数の時間変化を表す近似式を事前に仮定する必要がなく、自動的に推定可能であることが示された。これは従来の方法にはない特長である。次に、炭素鋼の連続鋳造において、実際に鋳型で測定された温度から、時間変化する熱伝達係数が粒子フィルタによって推定された。また、推定結果を用いた伝熱解析によって実測の温度変化が再現された。つまり、データ同化を用いれば、鋳型の測定温度から時間依存の熱伝達係数を推定可能であることが示された。

第6章は本論文の総括である。

これを要するに、著者は、拡張性と簡便さを兼備した新たな凝固シミュレーションのパラメータ推定方法を構築したものであり、計算材料科学の分野における工学的及び学術的な進歩に貢献するところ大なるものがある。よって著者は、北海道大学博士(工学)の学位を授与される資格あるものと認める。