

氏名（本籍）	小川 丈太（秋田県）
専攻分野の名称	博士（理工学）
学位記番号	理博甲第8号
学位授与の日付	令和 5年 3月 23日
学位授与の要件	学位規則第4条第1項該当
研究科・専攻	理工学研究科 総合理工学専攻
学位論文題目 （英文）	セルオートマトン法およびレベルセット法に基づく凝固組織・偏析予測のための数値モデルに関する研究
論文審査委員	(主査) 教授 林 滋生 (副査) 教授 齊藤 嘉一 (副査) 教授 大口 健一 (副査) 准教授 棗 千修

論文内容の要旨

金属材料の多くは凝固過程を経て製造されており、凝固中の熱や物質、運動量の輸送などの影響によって、多様な凝固組織および偏析が形成する。それらは金属材料の特性に大きな影響を与えるため、その詳細な形成メカニズムの解析が求められており、数値シミュレーションを用いた凝固組織予測に関する研究が盛んに行われている。その数値モデルには、凝固組織の基本構成となるデンドライト形態を精度良く予測することを目的としたミクロ凝固組織モデルと、鋳物などの材料全体の凝固組織を予測することを目的としたマクロ凝固組織モデルがあり、対象とする空間スケールに応じて様々なモデルが提案されている。

ミクロ凝固組織の予測では、Gibbs-Thomson 効果と固液界面における溶質保存の関係を満たす固液界面移動を記述するモデルが必要であり、フェーズフィールド (Phase-field, PF) 法、セルオートマトン (cellular automaton, CA) 法による数値モデルが提案されている。PF 法は上記の関係を厳密に満たすように数学的な補正などが行われ、現状、最も高精度にミクロ凝固組織を予測できるとされている。しかし、計算コストの高さが課題であり、大規模シミュレーションには高性能計算機が必要である。CA 法は、数値アルゴリズムが簡便なため計算コストが低く、PF 法に対して 1/10 以下の時間で計算できることもある。また、上記の関係を満たす支配方程式でモデル化されているが、数値解法の原理上、PF 法に比べ

計算精度が劣る点に課題がある。

マクロ凝固組織の予測では、核生成と結晶粒の成長をモデル化することが基本であり、結晶粒はデンドライト形態のエンベロープによって近似されるため、デンドライト形態の詳細な情報は欠落するが、マイクロ凝固組織モデルでは取り扱いが困難な mm スケールの凝固組織予測が可能である。数値モデルには上記のマイクロ凝固組織のモデルとは異なる成長アルゴリズムの CA 法が用いられる。多様なマクロ凝固組織の予測が可能である一方で、流動のようなマクロ現象と連成して結晶粒移動を取り扱うには、粒成長アルゴリズムの煩雑さが障害となりマルチフィジックスモデルとしての展開に課題がある。

上述のように、各空間スケールにおける凝固組織モデルが提案されているが、より高度な凝固組織・偏析予測を行うためには、各モデルに内在する課題を解決する必要がある。マイクロ凝固組織モデルでは、低計算コストと高精度化の両立、マクロ凝固組織モデルでは、マルチフィジックスへの対応が必要であり、本研究では、これらの課題を解決する数値モデルの開発を行った。その成果をまとめた本論文は、6章から構成されている。各章の概要を以下に示す。

第1章は序論であり、研究背景として、凝固組織および偏析を予測するための数値モデルの概要と、その課題を示し、本研究の目的と意義について述べた。

第2章では、マイクロ凝固組織・偏析に関するモデル開発を行った。マイクロ凝固組織モデルには CA 法を用い、高度な組織予測モデルへの展開として多相凝固（共晶および包晶）の組織予測モデルを開発した。共晶モデルに関しては、Jackson-Hunt 理論および実験、PF 法によるシミュレーションとの比較を行い、CA 法による計算結果が、それらと一致することを確認した。包晶モデルでは、Fe-C 合金を対象にして従来型の包晶反応と、 $\delta \rightarrow \gamma$ 変態および γ 凝固による包晶変態を考慮し、1次元シミュレーションで包晶変態の挙動を、3次元シミュレーションで包晶反応の挙動を確認し、実験報告と一致することを示した。また、近年発見された連続的な γ 相の核生成によって進行するマッシュ的変態へ対応させるために曲率駆動の結晶粒成長モデルと連成し、マッシュ的変態後の γ 粒の粗大化現象のシミュレーションを行った。これらの結果、共晶および包晶反応を含む高度な多相凝固組織の予測に CA 法が適用できることを確認した。

第3章では、第2章に続き、マイクロ凝固組織・偏析に関するモデル開発を行った。多元系合金の凝固組織予測においては、固液界面の熱力学平衡計算に多大な時間を要することが課題である。そのため、熱力学平衡濃度計算を深層学習（Deep learning, DL）に代替した CA 法に基づく単相マイクロ凝固組織モデルを開発し、3次元デンドライト成長シミュレーションを行った。その結果、DL 代替モデルは従来の熱力学平衡濃度計算を用いたモデルよりも 100 倍程度高速に計算できることを確認し、機械学習の適用が計算高速化に有効であることを示した。また、GPU を用いた計算への適用性も確認し、CPU よりも数十倍高速に計算できることを示した。

第4章では、マクロ凝固組織・偏析に関するモデル開発を行った。CA 法におけるマクロ

凝固組織モデルの粒成長アルゴリズムの煩雑さの課題を解決するため、レベルセット (Level-set, LS) 法に着目し、エンベロープの成長を LS 法で取り扱う Level-set envelope (LSE) モデルを開発した。LSE モデルによるエンベロープの成長は成長速度に基づく移流方程式を解くだけであるため、アルゴリズムは CA 法よりも格段に簡便になる。この新しいマクロ凝固組織モデルを用いた 2 次元シミュレーションで結晶粒組織における粒界形成が適切に行えることを確認し、続いて 3 次元の一方向凝固組織のシミュレーションを行って LSE モデルで従来の CA 法に基づくモデルと同等のマクロ凝固組織をシミュレートできることを確認した。これらの結果から、マクロ凝固組織モデルとしての LSE モデルの妥当性を示した。

第 5 章では、マクロ凝固組織を考慮した凝固現象のマルチフィジックスシミュレーションを実現するために、第 4 章で開発した LSE モデルを液相流動・溶質・熱移動を連成計算するマクロ偏析モデルに組み込み結晶粒輸送を考慮したマクロ偏析モデルを開発した。モデル検証のため凝固時の結晶粒沈降現象を対象とし、単一および複数の結晶粒が沈降する 2 次元シミュレーションを行った。単一の結晶粒沈降シミュレーションでは、PF 法などのミクロ凝固組織モデルで報告されている結果と定性的に一致する結果が得られ、複数の結晶粒沈降シミュレーションでは、結晶粒間の溶質濃度の干渉などに伴う成長挙動の変化が適切に再現され、本モデルの妥当性を示した。

第 6 章では、本研究によって得られた主要な知見をまとめ、最後に今後の課題について述べた。

論文審査結果の要旨

1 論文審査結果の要旨

金属材料の多くは凝固過程を経て製造され、凝固中の熱や物質、運動量の輸送によって多様な凝固組織および偏析が形成される。これらは金属材料の特性に大きな影響を与えることから、凝固組織制御は極めて重要である。金属の凝固は、高温下で起こる物理現象であるため可視化が困難であり、凝固組織形成メカニズムの詳細な解明には、高度な数値シミュレーション技術が必要となる。金属・合金凝固の素過程は、対象によって空間スケールが異なるため、その数値モデルは、mm 以下のスケールの凝固組織・偏析を対象としたミクロ凝固モデルと、mm 以上のスケールの凝固組織・偏析を対象としたマクロ凝固モデルに分けられている。ミクロスケールでは、Phase-field (PF)法の発展により、多様なミクロ凝固組織が高精度で予測可能になってきたが、計算コストが高いため、PF 法に比べて計算コストが低いセルオートマトン (CA) 法による数値モデルの発展が期待されている。一方、マクロスケールでは、CAFE 法による凝固組織モデルが発展してきた。しかし、CAFE 法の組織形成アルゴリズムの煩雑さは、流動現象と凝固組織形成を同時に解析する必要があるマクロ偏析モデルの高度化には大きな障害となっている。したがって、この問題を克

服するための新たなマクロ凝固組織モデルの開発が求められている。

本論文では、各空間スケールの凝固組織モデルに内在する課題を解決するため、ミクロスケールでは、低計算コストで多様な凝固組織形成に対応した多相系および多元系合金の数値モデル、マクロスケールでは、流動現象と組織形成を連成したマルチフィジックスへの対応を目的とした新たなマクロ偏析予測の数値モデルの開発を行っている。その成果は、全6章にまとめられており、各章の概要を以下に示す通りである。

第1章は序論であり、凝固組織および偏析を予測するための数値モデルの概要とその課題を提示し、本研究の背景と目的を述べている。

第2章では、ミクロ凝固組織・偏析予測の高度化を目的にCA法に基づく多相凝固（共晶および包晶）組織の数値モデル開発について述べている。多相凝固組織および理想結晶粒成長のモデル開発を行い、これらのモデルによる計算結果は、理論、実験、PFシミュレーションと比較され、検証の結果からモデルの妥当性が示されている。

第3章では、多元系合金のミクロ凝固組織・偏析予測の計算高速化を目的に機械学習を活用した数値モデル開発について述べている。多元系合金のミクロ凝固組織予測における平衡濃度計算の膨大な時間量を、平衡濃度計算を深層学習に代替することで解決するCA法に基づくミクロ凝固組織モデルを開発し、従来法よりも100倍程度高速に計算できることを確認し、機械学習適用の有効性を示している。

第4章では、第5章で述べるマクロ偏析モデルの高度化を目的とした新たなマクロ凝固組織モデルの開発について述べている。CAFE法における成長アルゴリズムの煩雑さの課題を解決するため、Level-set envelope (LSE) モデルを開発し、従来のCAFE法と同等のマクロ凝固組織がシミュレーション可能であることを示している。

第5章では、マルチフィジックス化の実現を目的に、LSEモデルによる凝固組織形成と液相流動・溶質・熱移動を連成するマクロ偏析モデルを開発し、結晶粒輸送を考慮した革新的なマクロ偏析シミュレーションを実現している。

第6章では、本研究によって得られた主要な知見をまとめ、最後に今後の課題について述べている。

以上のように、本論文は、金属材料の凝固組織・偏析予測モデルを高度化するための多くの知見を含み、鋳造プロセスおよびその周辺技術に大いに貢献するものである。したがって、本論文は、博士（理工学）の学位論文として十分に価値があるものと認められる。

2 最終試験結果の要旨

博士論文公開審査会において、申請者が本論文について約45分の口頭発表をした後、約45分の口頭試問を実施して最終試験とした。口頭試問の内容は、以下のように要約される。

- (1) 単相のミクロ凝固組織モデルに用いられている固相率というものは、多相モデルと同じものを意味しているのかとの質問がなされた。
- (2) 共晶モデルにおいて理論、実験、PFシミュレーションと多数のものを比較している

が、理論だけの比較でも良いのではないかとの質問がなされた。

- (3) ミクロとマクロのモデルについて研究を行っているが、異なるスケールのモデル間に研究としてのつながりはあるのかとの質問がなされた。
- (4) マクロ偏析シミュレーションで凝固組織形成を考慮したときと考慮しないときでは何が異なっているのかとの質問がなされた。
- (5) GPU 計算で陽解法を用いているが、陰解法が有利になることはないかとの質問がなされた。

これらを含め全ての試問に対する回答は、いずれも慎重且つ的確であった。このため、総合的に判断して、最終試験結果を合格とした。