

令和 2 年 6 月 16 日現在

機関番号：11401

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2017～2019

課題番号：17K06874

研究課題名(和文) データサイエンスを駆使した革新的凝固組織予測法の開発

研究課題名(英文) Development of an innovative model to predict solidification structures using data science approach

研究代表者

梶 千修 (Natsume, Yukinobu)

秋田大学・理工学研究科・准教授

研究者番号：80632752

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,700,000円

研究成果の概要(和文)：金属材料の凝固組織形成シミュレーションを高度化するために、データサイエンスの一手法であるデータ同化を用いて、実測が困難な鋳型-鋳物間の熱伝達係数および凝固組織形成に必要な核生成のモデルパラメータの推定法を構築し、試行錯誤的操作のない各種パラメータ評価を可能とした。また、機械学習を用いた凝固組織の推定法についても検討した。これらのデータサイエンス手法を用いることで組織解析の高速化と高精度化を両立できることを明らかにした。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究課題で得られた研究成果の学術的意義は、従来の凝固組織予測法には用いられていなかったデータサイエンス的アプローチを、モデル内の各種パラメータ評価に用い、評価者の主観によるパラメータの不確実性や高度な専門知識に基づく評価基準を排除できる方法を構築したことであり、これは、凝固組織予測法の幅広い産業応用への課題でもあるため、今後、応用研究としてさらに発展させることで社会的にも意義ある成果であると考えている。

研究成果の概要(英文)：A method to estimate the heat transfer coefficient based on data assimilation has been developed for the casting processes. To understand its usefulness for estimating the time-dependent heat transfer coefficient, herein we performed the experiments of unidirectional and sand castings. The experimental data were then used to validate the estimated time-dependent heat transfer coefficient. Consequently, the measured cooling curves could be accurately simulated. Next, the nucleation parameters including in a numerical model to predict solidification structures were estimated using the data assimilation technique. We confirmed that the parameter estimations for simulating quantitatively the grain size of solidification structures could be easily and quickly performed without trial and error. Therefore, it was found that the data science approaches were very useful and effective tools to advance the models to simulate the solidification processes.

研究分野：材料工学

キーワード：凝固 データ同化 データサイエンス 凝固組織 鋳造 セルオートマトン法

## 様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

### 1. 研究開始当初の背景

(1) 材料組織は、様々な材料特性に大きな影響を与える。特に金属材料の多くは凝固過程を経て作成されることから、凝固組織は材料特性を決める指標の一つとなっている。近年、金属 3D プリンターによる革新的材料製造プロセスが注目されており、その中でも凝固組織マップ(冷却速度や温度勾配などの凝固条件と組織の関係図)を用いた製造条件の決定が重要研究課題とされている。

(2) 近年、凝固組織シミュレーションが急速に発展し、Phase-field法、Cellular Automaton(CA)法がその主な凝固組織予測法として用いられている。このような凝固組織シミュレーションの発展により、高精度な凝固組織予測の可能性は現実的なものとなってきたが、予測精度の向上には、シミュレーションで用いるモデル起因のパラメータ評価が必要である。現在、いくつかのパラメータ評価は、人手による試行錯誤的操作であり、評価判定基準の曖昧さもある。このようなパラメータ評価を簡便かつ正確に行うことが凝固組織予測法の高精度化への課題となっている。

(3) 人工知能などのデータサイエンスに基づく新技術が脚光を浴び、特に機械学習・深層学習による画像認識や最適経路探索など、人間の思考に類似した推定技術の発展は目覚ましい。このようなデータサイエンス的アプローチは、各種シミュレーションにおけるパラメータ推定に有効であり、凝固組織シミュレーションにおいてもその有効性が期待されている。

### 2. 研究の目的

(1) 本研究では、凝固組織シミュレーションで用いる試行錯誤的操作によって評価するパラメータ(熱伝達係数、核生成確率変数)をデータサイエンスの一手法であるデータ同化を用いて自動推定できるモデルを構築する。

(2) 機械学習・深層学習による凝固組織推定技術を利用した凝固組織マップ(凝固条件と凝固組織の関係図)作成法の可能性を検討する。

### 3. 研究の方法

(1) 熱伝達係数は、溶融金属(溶湯)と鋳型などの接触状態によって時々刻々と変化するパラメータであり物性値ではないため、熱伝達係数は時間の関数として推定する。まずは、底部水冷型一方向凝固(1次元凝固伝熱に相当)における溶湯-水冷 Box 間の熱伝達係数推定(1つのパラメータ推定)を行う。Al-Si 合金の一方向鋳造実験により取得した冷却曲線をデータ同化手法の一つである粒子フィルタと凝固伝熱解析を連成したモデルを用いて時間依存の熱伝達係数推定の条件や実測の冷却曲線を再現する精度等を検証する。次に、複数のパラメータ推定として砂型鋳造の熱伝達係数推定を行う。

(2) CA モデルでの凝固組織解析に用いられる核生成には、ガウス分布に基づく核生成密度が与えられる。この核生成モデルには、最大核密度、平均核生成過冷度、標準偏差の3つの核生成確率変数があり、これらを核生成パラメータと呼ぶ。底部水冷型一方向凝固による実組織の平均結晶粒度を実測データとし、データ同化(粒子フィルタ)とCAモデルを連成したモデルにより平均結晶粒径を再現することで、核生成パラメータの推定を行う。

(3) 凝固組織マップを作成する上で様々な凝固条件での凝固組織解析を実施するには膨大な時間を要するため、機械学習などのデータサイエンスの活用が有効である。機械学習による凝固組織画像推定を利用した凝固組織マップ作成法として、まずは、機械学習での凝固組織の推定法(事前の組織計算結果を学習して、そのデータのみで組織を推定する方法)の可能性を検討する。

### 4. 研究成果

(1) 一方向凝固(1次元凝固伝熱に相当)における溶湯-水冷 Box 間の熱伝達係数推定を行った。底部水冷型の一方向鋳造実験は、内寸 30×200mm の耐熱レンガ製の鋳型を 700 に予熱し、鋳造直前に鋳型を水冷 Box の上に置き、685 の Al-1wt%Si 合金溶湯を鋳造した。鋳造直後、鋳型上部に 700 に予熱した耐熱レンガ製の蓋を置くことで底部のみから抜熱する一方向凝固とした。鋳型には底部から 10, 20, 50, 80, 120, 180mm 位置の溶湯温度を実測するための熱電対を設置し、6 点の冷却曲線を得た。粒子フィルタに基づく熱伝達係数の推定は、底部水冷 Box と溶湯間の熱伝達係数を対象とした。上部および側面からの抜熱は無いものとし、1次元の凝固伝熱シミュレーションにより熱伝達係数の推定を行った。実測の冷却曲線に対し1秒間隔での熱伝達係数の最尤値を評価して時間変化する熱伝達係数を推定した。

粒子フィルタによって推定した熱伝達係数を用いた凝固伝熱シミュレーションによる冷却曲線(破線)と実測の冷却曲線(実線)の比較を図1(a)に示す。底部の熱伝達係数のみを推定対象としているため底部から離れた位置ほど冷却曲線の再現性は低下するものの、底部から10mm位置では、ほぼ忠実に冷却曲線を再現しており、底部から最も離れた180mm位置でも概ね再現できていることがわかる。このときの粒子フィルタで推定された熱伝達係数の時間変化を図1(b)に示す。水冷による初期の急激な抜熱に対応して非常に高い熱伝達係数(29461.5W/m<sup>2</sup>K)から始ま

り、その後すぐに  $6000\text{W}/\text{m}^2\text{K}$  程度まで低下して経過時間 500 秒に達するまでに  $1000\text{W}/\text{m}^2\text{K}$  程度まで徐々に低下した。このような分布は事前に近似式を仮定することでは対応が難しく、データ同化を適用したことで得られた結果であると言える。また、このような結果を得るために要した計算時間は数分～数十分程度であり、試行錯誤的な評価に比べて大幅に評価時間を短縮できることも検証できた。

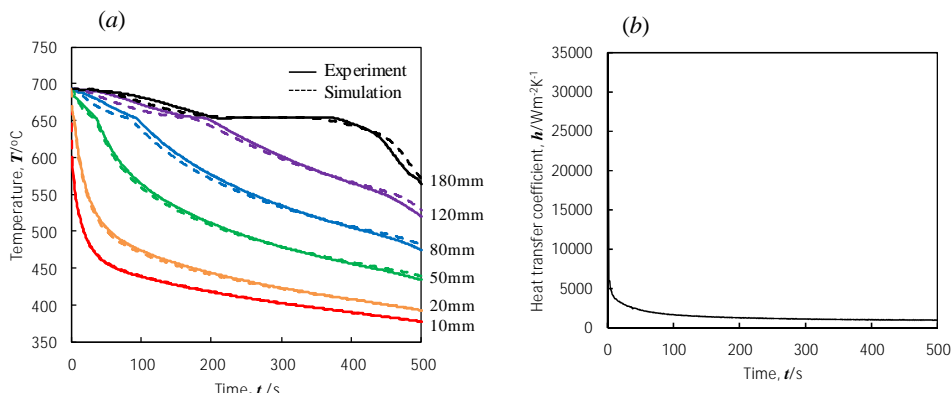


図1 底部水冷型の一方向凝固実験における(a)冷却曲線と(b)データ同化を用いて推定した熱伝達係数

(2) 粒子フィルタに用いるパラメータの影響についても調査した。図2は熱伝達係数の推定に用いる冷却曲線のデータ数を 10mm 位置 (図2(a)) と 20mm 位置 (図2(b)) のそれぞれ1つにした場合の冷却曲線の再現性を確認したものである。推定する熱伝達係数が溶湯-水冷 Box 間であるため、水冷 Box に近い 10mm 位置の冷却曲線データのみを用いて熱伝達係数を推定する方が、より冷却曲線の再現性が良いことがわかった。すなわち、熱伝達係数を評価したい熱境界にできるだけ近い冷却曲線データを用いて推定することで、高精度な冷却曲線の予測が可能である。

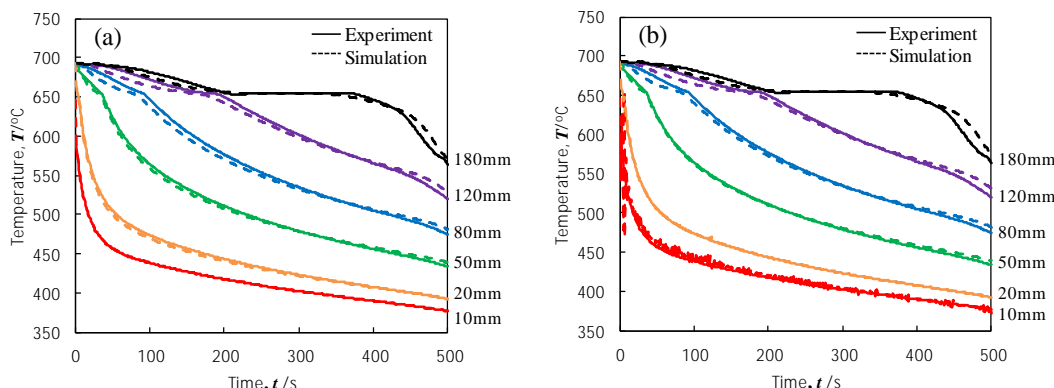


図2 異なる冷却曲線データによる熱伝達係数推定を実施した時の冷却曲線それぞれ(a)10mm位置、(b)20mm位置の冷却曲線のみで推定

(3) 複数の抜熱方向 (側面, 底面) をもつ砂型鑄造における熱伝達係数の推定を行った。抜熱方向が複数であるため 3 次元凝固伝熱シミュレーションと組み合わせた熱伝達係数の同時推定が正攻法であるが、粒子フィルタを用いると計算量が膨大になるため、一方向凝固での結果を踏まえて側面および底面近傍の冷却曲線データのみを用いた局所的な 1 次元抜熱の問題として、それぞれの抜熱方向に対する独立した熱伝達係数の推定を行うこととした。これにより低計算量での推定が可能かを検証した。想定通り砂型鑄造であっても局所的な冷却曲線は精度良く再現され、それに対応する時間依存の熱伝達係数を推定することができた。しかしながら、ここで推定された側面および底面の熱伝達係数を用いた 3 次元凝固伝熱シミュレーションで砂型鑄物内の複数箇所の冷却曲線の再現性を確認したところ、全ての位置での冷却曲線を適切に再現することができなかった。これは、合金全体の 3 次元熱伝導が局所的に推定した熱伝達係数に反映されていないことが原因と考えられ、熱伝導率も含めた 3 次元での熱伝達係数の同時推定の必要性が明らかになった。

(4) CA モデルでの凝固組織解析に用いられる核生成パラメータのデータ同化による推定を行うために、微細化剤添加による Al-1wt%Si 合金の底部一方向凝固実験を行って全面微細等軸晶組織を得た。底部から上部にかけて冷却速度が小さくなるため、等軸晶の平均結晶粒径は上部に向かって徐々に大きくなる。底部から 10mm 間隔で平均結晶粒径 ( $76 \sim 234\mu\text{m}$ ) を算出し、核生成パラメータを推定するための実測データとした。微細等軸晶組織のシミュレーションで最も効

果的な核生成パラメータは、最大核密度であるため、ここでは他の2つのパラメータを固定して最大核密度のみを推定することとした。推定の結果、平均結晶粒径の実測と計算の平均誤差は10 $\mu\text{m}$ 程度であり、結晶粒組織が精度良く再現された。核生成パラメータである最大核密度は底部から上部にかけて若干小さくなるものの、ほぼ一定値で推移することがわかった。これにより、データ同化を用いることで核生成パラメータの推定が可能であることが確認でき、試行錯誤的な評価に比べて大幅に評価時間を短縮できることも検証できた。

(5) 機械学習による凝固組織画像推定を利用した凝固組織マップ作成法として、凝固組織シミュレーションに用いる支配方程式を解かない機械学習での凝固組織の推定法の検討として、まず、凝固組織シミュレーションに必須の熱力学データ(平衡状態図)をニューラルネットワーク(NN)で学習させ、三元系合金状態図を精度良く再現できることを確認した。この方法で平衡状態図を推定すると、従来のCALPHAD法で平衡状態図を計算するよりも約4000倍高速に計算(推定)できることがわかった。NNによる平衡状態図の推定モデルを凝固組織形成シミュレーションモデルに組み込むことによって、固液界面の局所平衡条件の高速化が期待でき、結果として組織シミュレーションを10倍程度高速化できた。さらに各支配方程式から計算される温度場、濃度場、固相率場などの物理量の関係を学習させることによって凝固組織シミュレーション結果を直接出力できるようになり、組織予測計算の大幅な高速化が期待できる。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計1件（うち査読付論文 1件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 1件）

1. 著者名 Yukinobu NATSUME, Yukimi OKA, Jota OGAWA, Munekazu OHNO	4. 巻 150
2. 論文標題 Estimation of Time-dependent Heat Transfer Coefficient in Unidirectional Casting Using a Numerical Model Coupled with Solidification Analysis and Data Assimilation	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 International Journal of Heat and Mass Transfer	6. 最初と最後の頁 119222
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2019.119222	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

〔学会発表〕 計4件（うち招待講演 1件/うち国際学会 0件）

1. 発表者名 栗 千修
2. 発表標題 鋳造組織シミュレーションへのデータサイエンスの適用
3. 学会等名 秋田大学革新材料研究センター（セミナー）（招待講演）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 栗千修, 内山涼介, 岡ゆきみ, 大野宗一
2. 発表標題 データ同化を利用した一方向凝固解析における時間依存熱伝達係数の自動推定
3. 学会等名 日本鋳造工学会 第97回東北支部鋳造技術部会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 栗千修, 内山涼介, 岡ゆきみ, 大野宗一
2. 発表標題 粒子フィルタに基づく熱伝達係数の推定を導入した凝固解析による一方向鋳造実験の冷却曲線再現
3. 学会等名 日本鉄鋼協会 第176回秋季講演大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 内山涼介, 棗千修
2. 発表標題 セルオートマトンモデルを用いた凝固組織形成シミュレーションにおける組織再現性
3. 学会等名 日本金属学会
4. 発表年 2017年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究協力者	小川 丈太  (ogawa jota)	秋田大学・理工学研究科・大学院生  (11401)	
研究協力者	及川 利彦  (oikawa toshihiko)	秋田大学・理工学部・学生  (11401)	
研究協力者	佐藤 拓実  (sato takumi)	秋田大学・理工学部・学生  (11401)	
研究協力者	永瀬 萌  (nagase moe)	秋田大学・理工学部・学生  (11401)	