

氏名	ヤマムラ アヤノ 山村 彩乃
学位(専攻分野)	博士(工学)
学位記番号	博 1 2 1 5 号
学位授与の日付	令和 8 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	工芸科学研究科 設計工学専攻
学位論文題目	凝固組織の高精度予測に向けた phase-field データ同化システム開発に関する研究
審査委員	(主査) 教授 高木 知弘 教授 森田 辰郎 教授 飯塚 高志 京都大学教授 安田 秀幸

論文内容の要旨

新しい金属材料の開発および既存材料の機能向上に向けて、メゾスケールにおける材料組織形成過程のデジタルツインを実現することが急務である。そのためには、数値シミュレーションによって組織形成過程をデジタル空間上で再現することが不可欠であるが、その入力に必要な各種物性値の不足が大きな課題となっている。本研究では、組織形成の起点となるデンドライト凝固現象を対象とし、大型放射光施設における時間分解 X 線イメージング (4D-CT) の結果を、デンドライト成長を最も高精度に再現可能な phase-field (PF) 計算に融合することで、物性値推定を可能とするデータ同化システムを構築することを目的とした。一方で、4D-CT には空間解像度に関する課題が存在するが、本研究で構築したデータ同化システムにより、計算および実験の双方が抱える課題の同時解決を図った。

本学位論文は全 8 章から構成されている。第 1 章では、本研究の背景および目的について述べている。

第 2 章では、液相流動を伴う二元合金のデンドライト凝固現象を対象として、PF-格子ボルツマン (PF-LB) モデルとアンサンブルカルマンフィルタを組み合わせたデータ同化システムを構築した。まず、強制対流条件下における 2 次元デンドライト成長を対象とした双子実験を実施し、動粘性係数の推定に成功した。これにより、構築したシステムが観測データを PF-LB 計算へ適切に同化可能であることを示した。さらに、固体運動を含む 2 次元デンドライト成長問題へとシステムを拡張し、密度差による固相の沈降を伴う等軸デンドライト成長問題においても、観測データが適切に PF-LB 計算に融合可能であることを確認した。

第 3 章では、本システムを GPU 並列計算に対応させることでスパコン上での大規模計算を可能とした。これを用いて、薄膜内における 3 次元柱状デンドライト成長を対象とした系統的な双子実験を通じて、システムの特性を詳細に評価した。その結果、複数の物性値、結晶方位、および 3 次元デンドライト形態を同時に高精度で推定可能であることを示した。また、実際の X 線観察結果の利用を想定し、解像度の異なるボクセルデータを観測として用いたデータ同化を実施した。その結果、PF 計算との互換性の観点から、ボクセルデータをそのまま用いることは適切でないことを確認した。一方で、ボクセルデータに PF 緩和計算を適用することで、高解像度データでは推

定精度の向上に有効である一方、低解像度データではその効果が限定的であることを示した。

第4章では、データ同化に伴う計算負荷が極めて高いという課題に対し、領域分割法および計算領域の一部のみを用いたパラメータ推定という2種類の計算効率化手法を検討し、いずれも計算コスト低減に有効であることを確認した。

第5章では、データ同化において多数同時に実行されるPF計算の効率化を目的として、適合格子細分化(AMR)法を導入し、AMR加速PFデータ同化システムを開発した。柱状デンドライト凝固を対象に、従来の均一格子を用いた場合と比較した結果、AMRの導入により計算効率が大幅に向上し、困難であった実験スケールでのデータ同化が可能となった。また、固液界面分率が小さい凝固初期においてAMRによる計算加速効果が特に顕著であることに着目し、平滑界面からの一方向凝固における界面形態遷移を対象としてパラメータ推定挙動を評価した。その結果、セルの競合成長が開始するまでの低い計算コストで、複数の材料物性値および結晶方位が推定可能であることを示した。

第6章では、その重要性にも関わらず界面物性が十分に解明されていないZn合金を対象として、固液界面エネルギー異方性がデンドライト形態に及ぼす影響を詳細に調査した。その結果、4D-CTにより観察された特徴的な14方向へのデンドライト成長形態を再現するためには、従来用いられていた界面異方性関数では不十分であり、高次項の追加が必要であることを突き止めた。さらに、Zn合金に対してデータ同化システムを適用し、複数の異方性係数および結晶方位を同時に推定可能であることを確認するとともに、本システムが六方晶合金に対しても汎用的に適用可能であることを示した。

第7章では、X線透過画像を用いたデータ同化の実現に向けて、奥行き方向の固相率分布を観測データとするデータ同化を試みた。薄膜サンプル内での柱状デンドライト成長問題を対象に、厚さ方向の固相率分布を用いた双子実験を実施し、物性値および3次元凝固形態を一定の精度で推定可能であることを確認した。

第8章では、本研究で得られた成果を総括するとともに、今後の展望について述べている。

論文審査の結果の要旨

本研究では、合金の凝固組織予測におけるデジタルツイン実現に向けて、数値シミュレーションの入力に不可欠な物性値が欠如しているという、工学的に極めて重要な研究課題を明確に定義している。先行研究の十分な調査および適切な文献引用により、本研究の学術的な位置づけも明確に示されている。この課題に対して、**phase-field**計算とX線イメージング実験をデータ同化により融合する、独創的かつ新規性の高い研究手法を導入し、そのシステムを構築している。さらに、データ同化に伴い計算コストが極めて大きくなるという問題に対し、GPUスーパーコンピュータの活用、高性能計算技術の導入、およびデータ同化手法における工夫など、高度な技術の導入と開発を行っている。

本研究の結果、構築したデータ同化システムの有効性、計算効率化手法の有用性が示された。また、平滑界面からの凝固初期段階において、低い計算コストで複数の物性値を同時に推定可能であることを示し、実用上有益な知見を提供している。加えて、重要な金属材料であるにもかか

わらず界面エネルギーに関する知見が乏しい亜鉛合金を対象として、従来のアプローチでは不十分であることを示すとともに、必要となる界面異方性情報を明らかにするという重要な成果を得ている。これらの結論に至る過程は明確かつ論理的であり、本研究が有する学術的および工学的な有用性は極めて高い。また、本論文は、語法、文章表現、構成、および引用のいずれにおいても適切にまとめられている。

本論文の基礎となる学術論文は、以下に示す査読付き論文 7 編および参考論文 1 編から構成されている。[2][3][5][6]は学術誌掲載論文、[1][4][7]は国際会議論文である。また、[8]は参考論文としての学術誌論文であり、現在修正稿が査読中である。これらはいずれも筆頭著者論文であり、質および数の両面において、本論文の研究成果を十分に裏付けるものである。

以上の審査結果より、本論文は学位論文として十分にふさわしいものであると判断した。

[1] [A. Yamamura](#), S. Sakane, M. Ohno, H. Yasuda, T. Takaki, Data assimilation for dendritic solidification with melt convection: phase-field lattice Boltzmann study, *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, 1274(1) (2023) 012044.

[2] [A. Yamamura](#), S. Sakane, M. Ohno, H. Yasuda, T. Takaki, Data assimilation with phase-field lattice Boltzmann method for dendrite growth with liquid flow and solid motion, *Computational Materials Science*, 215 (2022) 111776.

[3] [A. Yamamura](#), S. Sakane, M. Ohno, H. Yasuda, T. Takaki, Twin experiments and detailed investigation of data assimilation system for columnar dendrite growth in thin film, *Acta Materialia*, 281 (2024) 120356.

[4] [A. Yamamura](#), S. Sakane, H. Yasuda, T. Takaki, AMR-accelerated phase-field data assimilation for dendrite solidification, *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, 1335(1) (2025) 012012.

[5] [A. Yamamura](#), S. Sakane, H. Yasuda, T. Takaki, Efficient parameter estimation from a planar interface in directional solidification via AMR-accelerated phase-field data assimilation, *Journal of Materials Research and Technology*, 39 (2025) 4226-4233.

[6] [A. Yamamura](#), H. Yasuda, T. Takaki, Effects of Interface Anisotropy on the Solidification Morphology of Zinc Alloys and Development of Data Assimilation for Their Estimation, *ISIJ International*, 65(5) (2025) 695-703.

[7] [A. Yamamura](#), S. Sakane, M. Ohno, H. Yasuda, T. Takaki, Development of a data assimilation system for the investigation of the dendrite solidification process by integrating in situ X-ray imaging and phase-field simulation, *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, 1281(1) (2023) 012049.

[8] [A. Yamamura](#), H. Yasuda, T. Takaki, Revealing interfacial anisotropy effects on dendritic growth in zinc alloys: a phase-field study, *Materials & Design*, (2026) under review.