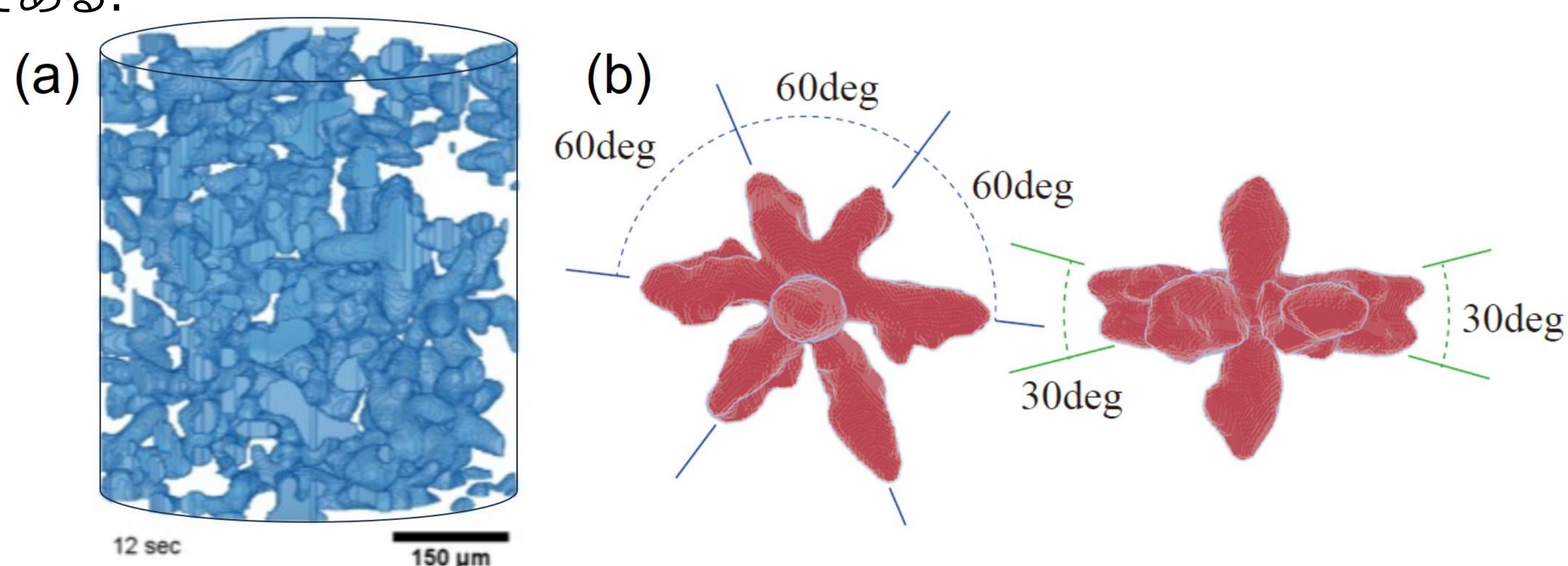


# 六方晶合金デンドライト凝固のデータ同化システム開発と形態評価

高木知弘<sup>1,\*</sup>, 青木尊之<sup>2,\*\*</sup>, 坂根慎治<sup>1</sup>, 山村彩乃<sup>1</sup>, 神吉俊輔<sup>1</sup>  
<sup>1</sup>京都工芸繊維大学, <sup>2</sup>東京工業大学, \*課題代表者, \*\*課題副代表者

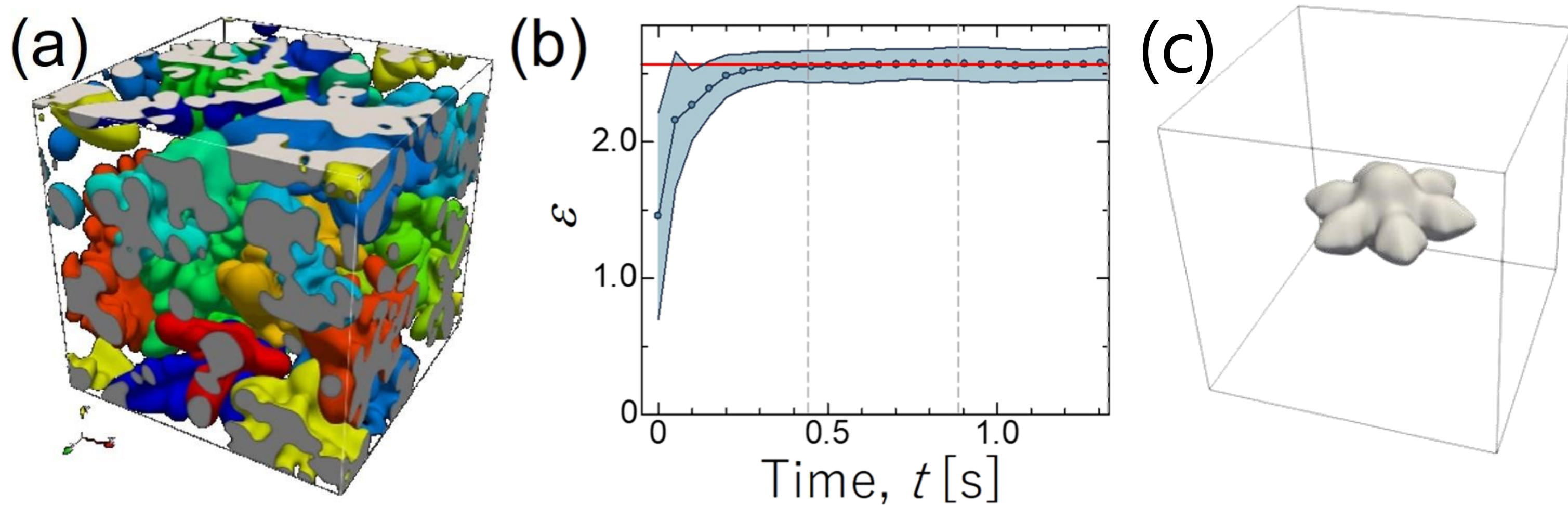
## 1. 緒言

凝固組織は全ての材料組織形成の出発点となる最も重要な組織であり、凝固組織の高精度な評価が材料組織制御の鍵である。デンドライトが合金凝固時の典型的な成長形であり、これまで多くの研究が行われているが、そのほとんどが立方晶材料に関するものであった。一方で、最近注目されているマグネシウム合金や亜鉛合金などの六方晶合金に関する研究は少ない。六方晶合金では合金組成によって界面エネルギーの異方性が変化することが報告されているが、その具体的値を取得する手法がない。さらに、デンドライト形態評価の最先端研究として、SPring-8などの大型放射光施設を用いた3次元時間分解その場観察(4D-CT)が行われているが、六方晶合金は容易に核生成するため立方晶合金と異なり観察が困難である。観測試料内で多くの核が同時に生成・成長し、この状態で凝固形態の評価、および形態から得られる情報を抽出することは極めて困難である。現在は、観測結果から「手作業」で綺麗に成長する粒を「発見」しており、多くの実験試行回数、時間、労力を要している。また、下図(b)に示すような、想定外の興味深い六方晶形態も観察されており、このような形態がどのようにして形成されるのか、実験だけではそのメカニズム解明は不可能である。以上のような六方晶合金の課題を解決する新しい研究手法の構築が急務である。

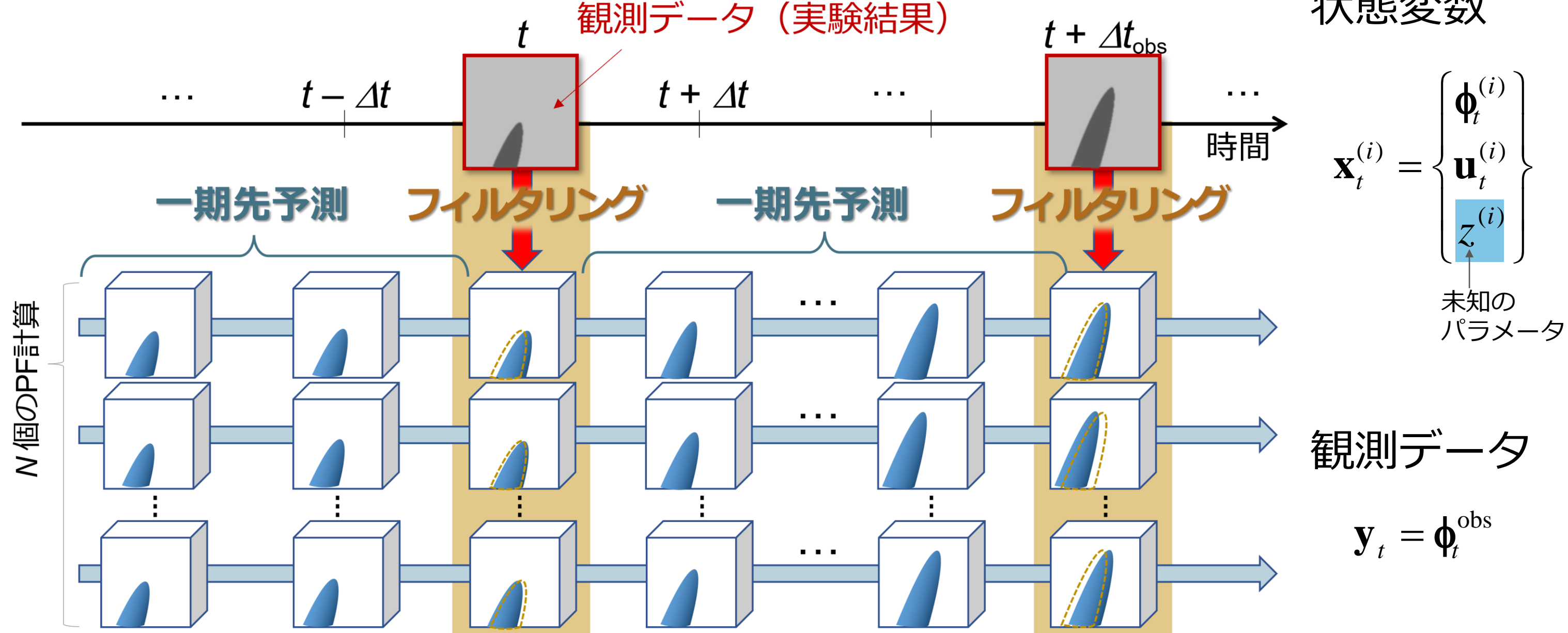


## 2. 今年度の目的

我々のグループでは、GPUスパコンによる高性能フェーズフィールド計算と大型放射光施設による4D-CTその場観察をデータ同化を用いて「融合」し、取得が困難であった物性値の推定や、凝固組織の高精度評価に関する研究を進めている。本研究では、六方晶合金に着目し、下図(a)のような複雑な多結晶等軸晶組織から様々な物性値を高精度に抽出可能なデータ同化を開発し、六方晶合金の凝固組織予測に関する先進的技術を開発することを目的とする。また、その結果を用いることで上図(b)のような特徴的な形態の形成メカニズム解明を行い、高精度な凝固組織予測に向けた基礎データを蓄積する。



## 3. データ同化システム



### 一期先予測

異方性関数  $a_s(\theta, \phi) = 1 + \varepsilon (\cos 6\phi \sin^6 \theta + p \cos^2 \theta + q \cos^4 \theta)$

$$\tau_0 a_s(\hat{\mathbf{n}})^2 [1 - (1-k)u'] \frac{\partial \phi}{\partial t} = \nabla [W_0^2 a_s(\hat{\mathbf{n}})^2 \nabla \phi] + \sum_{r=x,y,z} \frac{\partial}{\partial r} \left[ W_0^2 a_s(\hat{\mathbf{n}}) \frac{\partial a_s(\hat{\mathbf{n}})}{\partial \phi_r} |\nabla \phi|^2 \right] - \frac{df(\phi)}{d\phi} - \lambda^* \frac{dg(\phi)}{d\phi} (u+u')$$

$$\frac{1}{2} [1+k-(1-k)\phi] \frac{\partial u}{\partial t} = \nabla (D_l q(\phi) \nabla u - j_{AT}) + \frac{1}{2} [1+(1-k)u] \frac{\partial \phi}{\partial t} - \nabla \cdot J$$

### フィルタリング

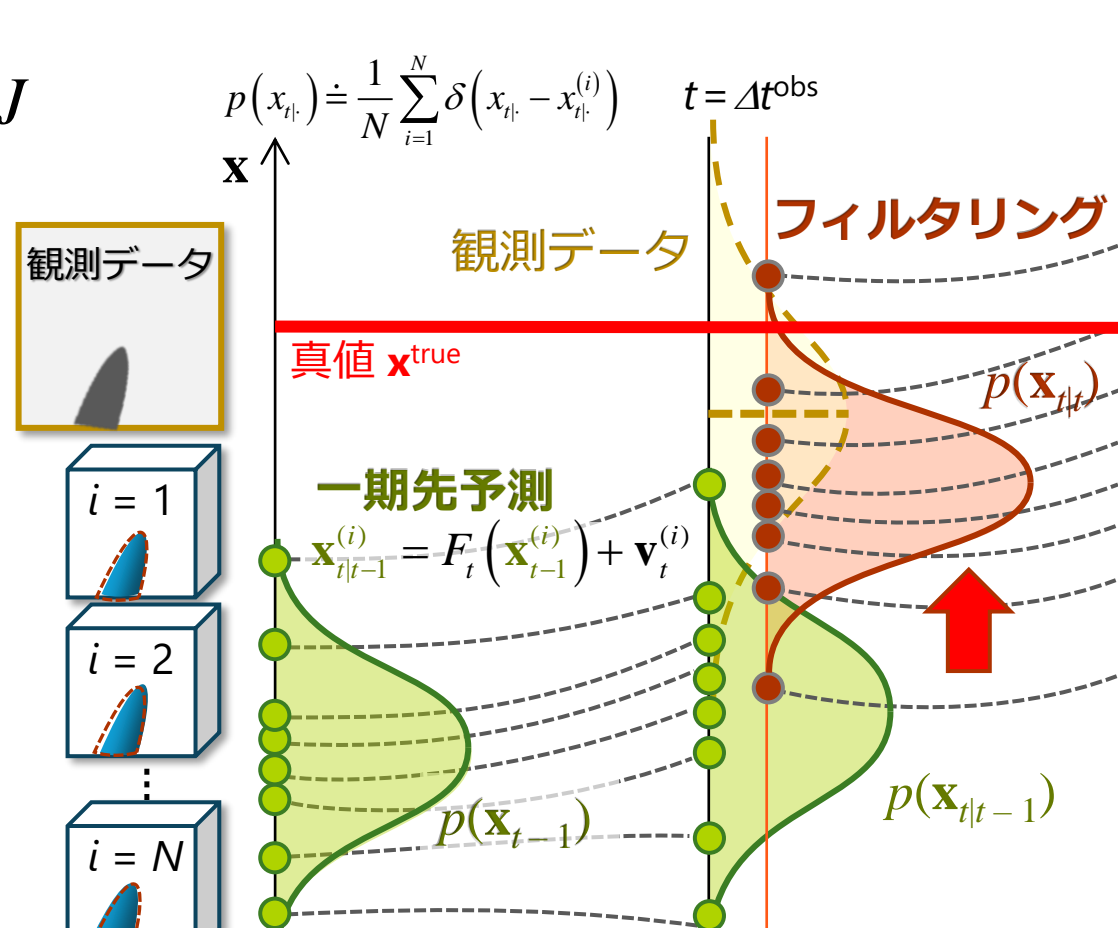
$$\mathbf{x}_{t|t}^{(i)} = \mathbf{x}_{t|t-1}^{(i)} + \mathbf{K}_t [\mathbf{y}_t + \tilde{\mathbf{w}}_t^{(i)} - \mathbf{H} \mathbf{x}_{t|t-1}^{(i)}]$$

$$\mathbf{K}_t = \mathbf{V}_t \mathbf{H}^T [\mathbf{H} \mathbf{V}_t \mathbf{H}^T + \mathbf{R}_t]^{-1}$$

$$\mathbf{V}_t = \frac{1}{N-1} \sum_{j=1}^N \tilde{\mathbf{x}}_t^{(j)} \tilde{\mathbf{x}}_t^{(j)T}$$

$$\tilde{\mathbf{x}}_t^{(i)} = \mathbf{x}_{t|t-1}^{(i)} - \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \mathbf{x}_{t|t-1}^{(j)}$$

$$\tilde{\mathbf{w}}_t^{(i)} = \mathbf{w}_t^{(i)} - \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \mathbf{w}_t^{(j)}$$



## 4. 研究計画

### 第1四半期 多結晶等軸晶に対するデータ同化システムの開発

- 立方体領域を取り出し、境界条件も決定するデータ同化を開発する。
- Multi-phase-field法を導入し、優先成長方位の異なる多結晶凝固を再現。
- 局所アンサンブルカルマンフィルタを用い計算を効率化する。

### 第2四半期 4D-CTその場観察結果を用いたデータ同化の実施

- SPring-8による4D-CTその場観察結果を用いたデータ同化。
- 時空間解像度の精度向上。
- 物性値、結晶方位、デンドライト形態を高精度に推定する。

### 第3四半期 特徴的な六方晶形態の形成メカニズムの解明

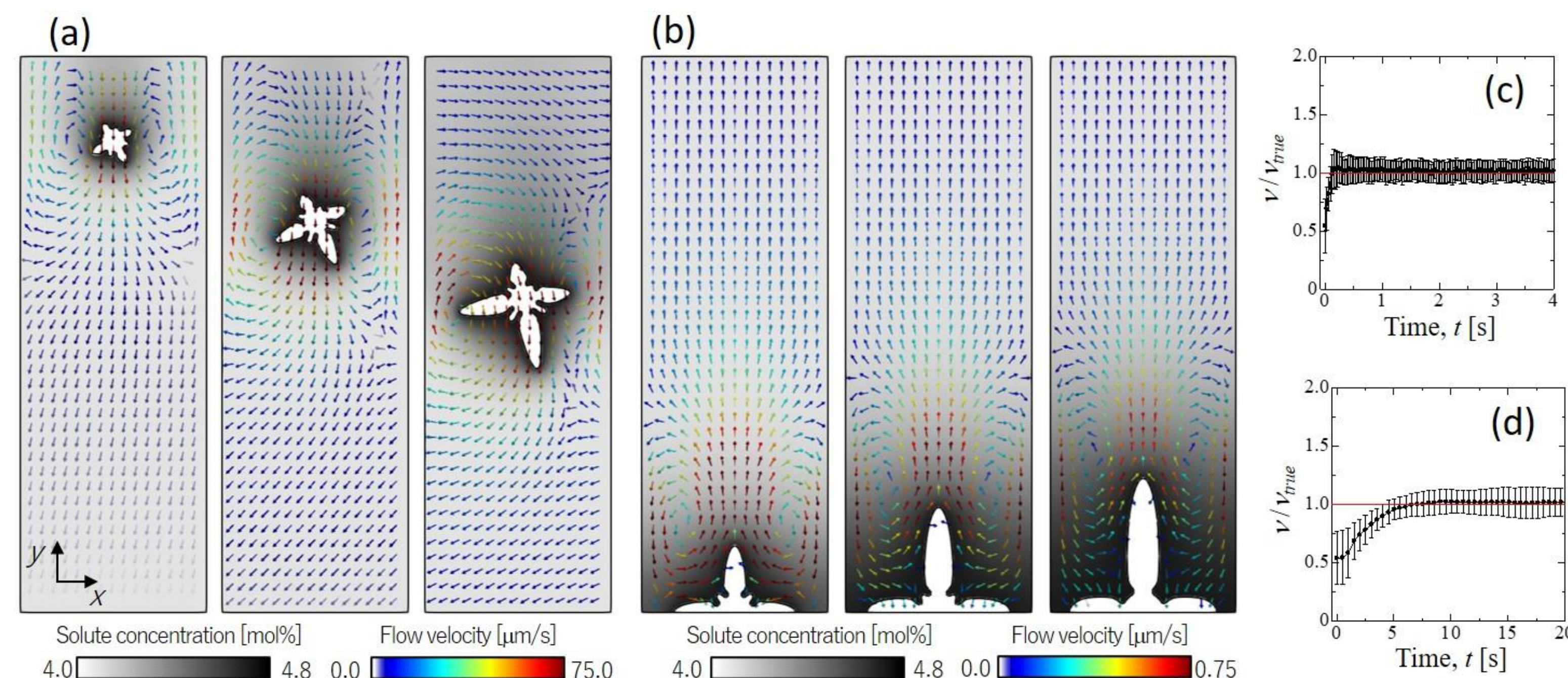
- 界面エネルギーの異方性強度を変えた系統的計算。
- 物性値が形態形成において演じる役割を詳細に検討する。

### 第4四半期 研究総括と次年度の研究に向けた検討

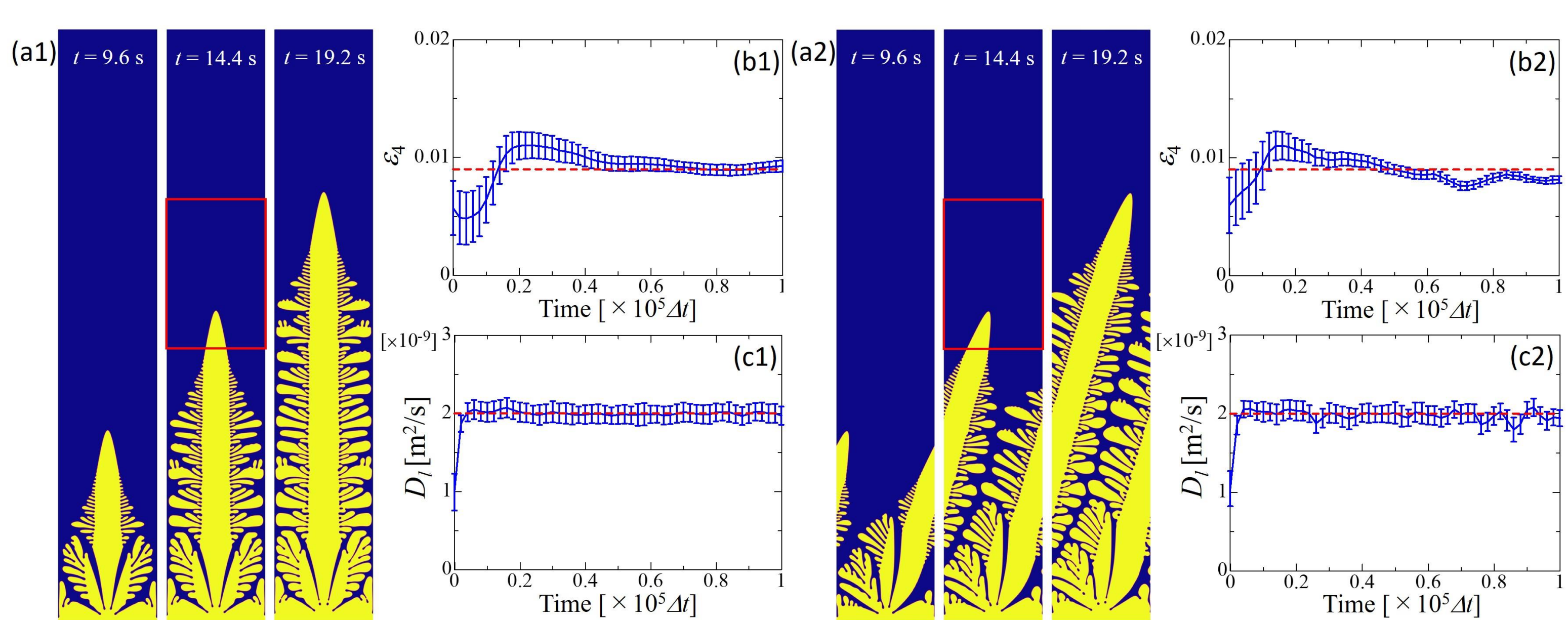
- 第1～3四半期の研究総括を行い、研究成果を論文化する。
- 2025年度の研究に向けた検討を行う。

## 5. これまでの研究成果 (2022年度 (hp220089), 2023年度 (hp230126))

### 5.1 強制対流と自然対流を伴うデンドライト成長問題に対するデータ同化



### 5.2 立方晶二元合金 一方向凝固問題に対するデータ同化



### 5.3 薄膜材の2次元透過像を観測データとした3次元デンドライト構造再現の検討

