

審査の結果の要旨

氏 名 金 浩 赫

材料開発においては、プロセス (Process)、組織 (Structure)、特性 (Property)、性能 (Performance) の 4 つの要素の相関関係 (PSPP 関係) の明確化が重要である。従来の材料開発では、研究者個人が蓄積してきた経験や勘からこの PSPP 関係を推察し、新たな材料を開発、更にその機能・性能を調査することで、新たな PSPP 関係を見出し、更なる材料開発に繋げるという循環が広く用いられてきた。しかし、このような循環は極めて属人的かつ偶発的であり非効率であるため、材料開発の更なる高度化や高速化には、この循環に代わる新たな枠組みの構築が望まれる。その様な中、材料科学とデータ科学の融合により、材料開発の時間やコストを大幅に削減しようという試みが、米国の Materials Genome Initiative に端を発し世界中で広く行われている。中でもターゲットとなる材料の特性や機能の特徴付ける物性値を、原子／分子スケールの電子状態のシミュレーションにより推定可能な無機材料の分野では、大きな発展を遂げている。しかし、構造材料分野では、材料の不均一性や現象の複合性や競合性のため、その挙動を完全に記述する物理モデルや数理モデルは存在しない。そのため、このような材料の不均一性やモデルの不完全性を踏まえ、PSPP 関係を効率的に抽出する枠組みの構築が不可欠となっている。

以上の背景のもと本研究では、データに普遍的に内在するスパース性を利用する手法であるスパースモデリングを適用することで、構造材料を対象とした PSPP 関係の効率的な抽出手法を検討し、様々な種類のデータを用いてその適用可能性を検証した。本論文は、以下の 6 章から構成される。

第 1 章では、構造材料分野で適用されてきたデータ科学的手法とその課題、既存の知見を説明し、本研究の位置付けと目標を明確にしている。

第 2 章では、スパースモデリングの概説を行い、更に人工的に作成したデータを用いて線形回帰モデルおよび非線形モデルに対する抽出精度の検証を行っている。線形回帰モデルでは、用いた手法の違いによる抽出精度の違いを評価した。また、非線形モデルでは、交換モンテカルロ法を用いた手法を適用し、その抽出精度の検証を行った。

第 3 章では、鉄鋼材料の A_{c3} 点と M_s 点を予測する線形回帰モデルの抽出を行った。入力データとして、Andrews が用いた 1960 年以前のデータベースと、物質材料研究機

構 (NIMS) が公開している 1980 年以降のデータベースを用いた。Andrews のデータベースを用いた場合は、Andrews の提案するモデルと同等の線形回帰モデルが抽出されており、公開データベースのみから多くの経験や勘を備えた研究者と同等の精度で、変態点を支配する重要な因子の抽出ができることが示された。また、Andrews と NIMS の 2 つのデータベースを用いた検証からは、公開データベースに内在する不確定性の抽出にも成功している。以上より、スパースモデリングを適用することで、公開データベースから鋼の変態点を支配する因子の効率的な抽出や推定モデルの構築が可能であると結論づけている。

第 4 章では、鉄鋼材料の変態キネティクスを支配する因子の抽出を行った。入力データとして、オーステナイト域からの連続冷却中に得られる相変態率の変化を用いた。ここではフェライト変態を対象に、粒界フェライトおよびサイドプレート形成モデルとして提案されている複数の Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogorov (JMAK) 型のモデルを考慮した。交換モンテカルロ法により抽出されたフェライト形成モデルは、急冷により得られた凍結組織の観察結果を良く説明することが示された。また、抽出された核生成頻度を決定づけるパラメータは、従来の冶金学的な組織観察から推定された値とよく一致することが示された。以上より、スパースモデリングの適用により、本来熱膨張曲線に内在する相変態開始温度や変態速度を支配するパラメータの効率的な抽出が可能であると結論づけている。

第 5 章では、金属材料の力学特性を決定づける組織因子の抽出を行った。まず、人工的に作成した大量の複相組織モデルに対して、粒界における G-N 転位の堆積を考慮した非局所結晶塑性有限要素法を適用することで、様々な結晶粒の初期硬さと形状や相分布を持った複相組織の降伏強度に関するデータベースを作成した。これにスパースモデリングを適用することで、降伏強度を決定づける組織因子の抽出を行った。その結果、構成する相の初期硬さの違いにより、重要となる結晶粒の形状や相分布の形態が異なることが明らかとなった。以上の結果より、スパースモデリングの適用により、様々な複相組織の力学特性に関するデータベースから、力学特性を決定付ける組織因子の効率的な抽出が可能であると結論づけた。

第 6 章は以上の総括である。

以上、本論文は構造材料分野におけるスパースモデリングの適用方法に関する新たな可能性を、PSPP 関係を構成する個々の相関関係の抽出を例として論じている。これらは本研究によって初めて解明された知見であり、材料工学分野に対する貢献は極めて大きい。よって本論文は博士（工学）の学位請求論文として合格と認められる。