

審 査 の 結 果 の 要 旨

氏 名 野口 聖史

材料設計は、所望の特性を持つ材料を同定し、その構造やプロセスを明らかにする逆問題であり、特に近年、従来の「膨大な実験」と「熟練者の経験や勘」に代わる材料設計・プロセスの最適化の方法として、数値モデルを用いた効率的な手法への期待が高まっている。その様な材料設計やプロセスの最適化を実現する上では、プロセス・構造・特性連関の把握が中心的な課題となるが、実際の材料設計においては、必ずしも従来の確定論的な数値モデルでは記述できない。これは、様々な時空間スケールを持った複数の物理現象の競合の結果として組織構造が決定するため、同一プロセスであっても組織の幾何形状は一意的に決定されず、常に確率的な分布として与えられるためである。従って、プロセス・構造・特性の確率論的な連関を獲得することが材料設計の肝であり、確率的な現象理解に従った新たな方法論の構築が不可欠となっている。

そこで本研究では、深層学習を用いてプロセス・構造・特性連関を不確実性を含めて抽出・解析し得る枠組みを確立することを目的とした。また、構築した枠組みにより獲得される相関の物理的な意味の抽出や分野で蓄積された物理的・材料的知見との親和性の観点から、構築された手法の展開を議論した。

各章の主要な結果は以下の通りである。

2章では、本研究の根幹を成す深層学習モデルの枠組みを提案した。材料構造を確率的に記述するための技術的課題とし、組織を記述する特徴量を適切に抽出すること、抽出した特徴量の空間的秩序とプロセスや特性との確率論的連関を抽出することの2点がある。本章では、前者を **Vector Quantized Variational Autoencoder (VQVAE)**、後者を **Pixel Convolutional Neural Network (PixelCNN)** と呼ばれる深層学習モデルを適用する妥当性に関して議論をした。さらに構築された枠組みに対して、連続冷却プロセスによって実際に得られた低炭素鋼組織画像を適用することで、プロセス・構造連関及び構造・特性連関の獲得が可能であることを検証した。その結果、特定の冷却速度から予測される鉄鋼組織は粒径や体積分率など基本的な幾何学的特徴量に関して、その平均的な挙動だけでなく確率的なばらつきも含め、十分な精度で推定できることが示さ

れた。また、力学特性から推定された鉄鋼組織に関しても、実際に得られる組織と定性的に一致することが確認された。これらの結果は、本研究で構築した枠組みが材料組織の不確実性を含め、プロセス・構造連関及び構造・特性連関を獲得できることを示している。

3章では、本研究の枠組みを用いて、データの背後にある材料的・物理的な知識を獲得可能であるかを検討するため、二相組織の中で破断伸びに支配的となる部分構造を同定する問題を用いた考察を行った。その結果、本枠組みから予測される支配的な部分構造と物理モデルが与える支配的影響度は十分な精度で一致することが確認された。この結果から、本研究の与える枠組みから材料的・物理的な知識をも獲得可能であることが示された。

4章では、データ不足を補う一つの方法として、分野に蓄積された知識と深層学習モデルの融合に関して議論した。深層学習モデルを材料分野へ適用する上での重要課題として、材料分野で蓄積されたデータ量が著しく少ないことが挙げられる。そのため、データ不足を補うための材料分野固有の議論が不可欠となっている。本章では、その解決手法の一例として、**Johanson-Mehl-Avrami-Kolmogorow (JMAK)** 式と本枠組みを融合することで、組成と熱処理条件からの鉄鋼組織を試みた。その結果、**JMAK** 式を導入することにより、未知組織の推定精度が飛躍的に向上することが確認された。この結果は、データ量の限られる材料分野では、既知の知見の融合がデータ不足を補う方法の一つとして極めて有効であることを示している。また、深層学習モデルと物理モデルの連結により、分野に蓄積された知見を取り込む一つの雛形を与えている。

5章では、他分野への展開として、分子構造最適化問題への適用を議論した。具体的には、特定の部分構造を有する構造から特定の性能を与える最適分子構造を探索する問題へ適用した。**RNN (Recurrent Neural Network)** を用いた従来手法と本研究の枠組みによる結果を比較した結果、提案する枠組みはよりロバストに探索可能であることが示された。

6章で各章にて得た知見を総括し、7章で本論文の結論を述べた。

本論文は、材料構造が持つ特徴量を潜在変数とし、プロセス・構造・特性連関を確率論的に獲得する手法の提案を行い、その連関を用いた材料設計・プロセス最適化への展開を様々な角度から検討した。従来の数値モデルに基づく手法では困難であった課題に対し新たな視点から極めて柔軟な解法を示しており、今後の冶金学の発展に向けた新たな布石となる論文と考えられる。

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。