

製造プロセスにおける数理的研究の現状と数学と物質・材料の連携、更なる数学連携の展開について

中川, 淳一
新日鐵住金株式会社先端技術研究所

<https://doi.org/10.15017/1956709>

出版情報：応用力学研究所研究集会報告．29A0-S7（1），pp.15-23，2018-03．九州大学応用力学研究所
バージョン：
権利関係：



応用力学研究所研究集会報告 No.29AO-S7
「非線形波動研究の新潮流－理論とその応用－」（研究代表者 辻本 諭）

Reports of RIAM Symposium No.29AO-S7

New trends in nonlinear waves - theory and applications -

Proceedings of a symposium held at Chikushi Campus, Kyushu University,
Kasuga, Fukuoka, Japan, November 9 - November 11, 2017

Article No. 03 (pp. 15 - 23)

製造プロセスにおける数理的研究の現 状と数学と物質・材料の連携、更なる 数学連携の展開について

中川 淳一 (Nakagawa Junichi)

(Received 15 January 2018; Accepted 6 March 2018)



Research Institute for Applied Mechanics
Kyushu University
March, 2018

製造プロセスにおける数値的研究の現状 と数学と物質・材料の連携、更なる数学連携の展開について

新日鐵住金株式会社 先端技術研究所 中川淳一 (Nakagawa Junichi)

概要

製鉄プロセスは大型装置で高温物質を扱うとともに相変化を伴う現象が多数存在し、大規模・複雑系の典型事例です。さらに、鉄鋼材料ではナノスケールの結晶格子、メソスケールの多結晶組織、マクロスケールの製品をマルチスケールの視点で制御することが求められています。製鉄プロセスと鉄鋼材料には、数理モデリング、逆問題、最適化、制御、ビッグデータ解析等、多くの数学・数理学の問題を包含しています。

本講演では、製鉄プロセスにおける数学の適用事例を使って、数学連携に関する講演者の考え方を紹介した後、いろいろな専門分野の数学者との学術連携を通じて 物質・材料科学系分野の未解決問題である「結晶群から対称性の数値指標を取り出す」、「材料のマクロな特性を決定する重要因子である結晶格子の乱れを記述する」、「ミクロ（離散）とマクロ（連続）を合理的・明示的に繋ぐための階層構造の仕組みを記述する」ための取り組みを紹介します。

1. 製造プロセスにおける数値的研究の現状

数学は社会の至るところに存在します。数学と製鉄業という一見意外な組み合わせのなかにも、数学を必要とする場面が多数あります。

例えば、図 1 に示す高炉を事例に考えます。高炉は、高さが約 35 m、内径が約 15 m の巨大な反応容器で、焼結鉱とコークスを化学反応させて、溶銑と呼ばれる約 1500℃ の溶けた鉄をとりだす工程です。高炉では、内部の状態を知りたいが直接計測が困難なため、炉底の煉瓦に埋設された熱電対の温度挙動が、非定常熱伝導方程式の解に可能な限り合致するように、煉瓦内面の伝熱状態を推定しています。ここでは、計測された結果から、その原因を特定する「逆問題」という数学手法を使います。

図 1-2 の熱電対で計測された 2 点の煉瓦温度の時系列データから、溶銑から煉瓦内壁面に流入する熱流束を計算しますと、図 1-3 に示すように温度計測値を見ているだけでは識別困難な熱流束の変動量の差異が現れます。図 1-2 の温度計測値は、通常、煉瓦を保護している凝固相が溶解し煉瓦温度が上昇したため、高炉への空気供給を止め溶銑の製造を約 1 日間休止する休風という操作を何度も繰り返し、凝固相が安定的に再生成するようになった過程を示す貴重なデータです。グラフの破線が休風を実施したタイミングを示します。

休風という系に与える外的刺激と熱流束の変動量の大きさの組み合わせが、系の安定性を示す重要な指標になることが判っています^{[1], [2]}。

表 1 は、高炉の伝熱逆問題で当初使用していました工学的的手法^[3]と、数学者との連携を通じ新たに開発した数学的手法^{[4], [5]}を比較したものです。図 2 は、高炉煉瓦の熱電対の位置を示す概念

図です。工学的手法では、変分法を採用しており、初期条件は既知であることが前提になっています。しかし、高炉煉瓦内部の全体の温度分布は計測されていないため、適当に初期温度分布を設定し、設定した温度分布の不確かさに起因する計算誤差が熱拡散の効果で無視できる時間を経験的に判定し、それ以降の計算結果を採用していました。一方、数学的手法では、放物型偏微分方程式の初期条件と片側のノイマン型境界条件が未知で、もう一方の境界条件としてノイマン型およびディリクレ型境界条件の双方が、計測で与えられることを前提に、数学解析を行います。図3に示すように、2種類の計測情報と2種類の未知変数の因果関係の数理的構造が明確になっているのが判ります。ただし、数値積分項①と②は、逆問題の数値計算上、極めて不安定であるため、数値計算アルゴリズムの工夫が必要になります^[4]。

上述しましたことは、高炉の伝熱逆問題という具体的な課題に対し、数学を使い、抽象的枠組みのなかで問題をとらえることで、問題の根源を明らかにできることを示しています。これにより、高炉の伝熱逆問題という個別化された課題が、「温度と熱流束の時間変化を同時計測することで材料内部の温度情報を推定する技術」として、工学的手法の技術概念を再構築することができました。

上述の技術概念は、赤外線サーモグラフィーを使った装置材料の非破壊診断技術に適用できます^[6]。赤外線サーモグラフィーとは、赤外線素子を用いて物体の表面温度分布を計測し画像化する装置で、産業、医療等、さまざまな分野で使われており、近年、注目を集めている技術です。

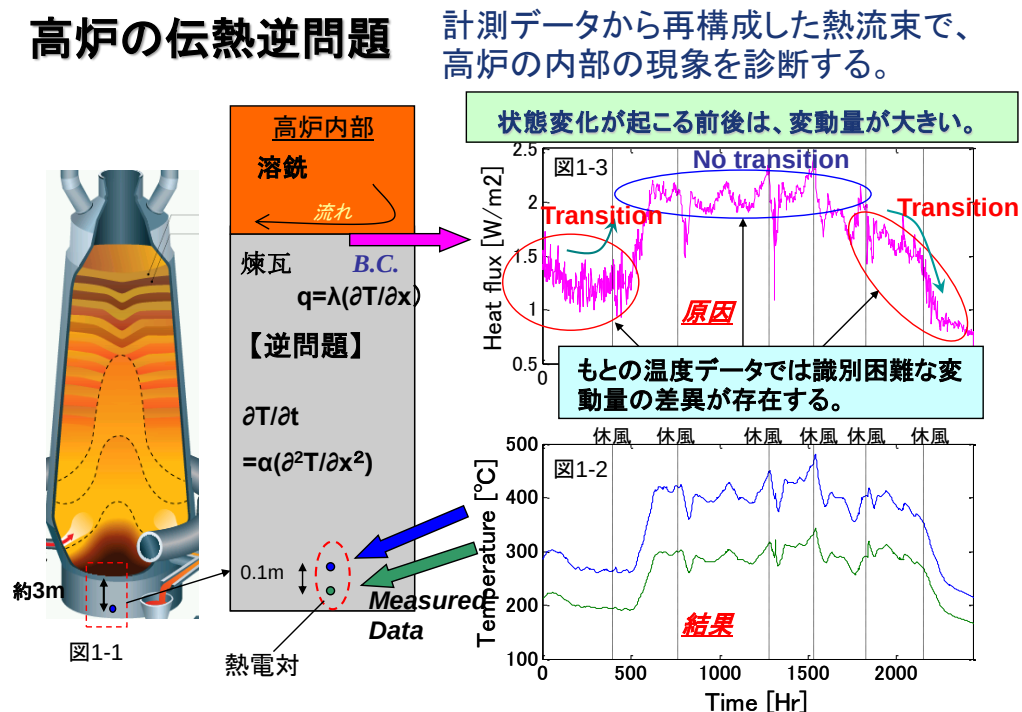


図1 伝熱逆問題の高炉への適用事例

表1 高炉の伝熱逆問題の工学的思考と数学的思考の比較

	工学的思考	数学的思考
$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$ (1)	煉瓦内部の熱収支を表す非定常熱伝導方程式	放物型偏微分方程式
$T(x,0)=T_0(x)$ (2)	煉瓦内部の初期温度分布を示す初期条件	初期条件
$\frac{\partial T}{\partial x}(0,t)=f(t)$ (3)	煉瓦内壁面の熱移動を表す境界条件	ノイマン型境界条件
$T(l,t)=\hat{T}_1(t)$ (4)	煉瓦背面の熱移動を表す境界条件	ディリクレ型境界条件
$T(l-\Delta x,t)=\hat{T}_2(t)$ (5)	変分法の誤差判定に使用	ノイマン型境界条件
	$\frac{\partial T}{\partial x}(l,t)=g(t) \approx (\hat{T}_2(t)-\hat{T}_1(t))/\Delta x$ (6)	

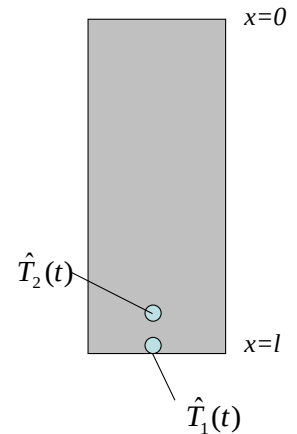


図2 高炉煉瓦の熱電対の配置と位置座標の設定

数学解析

2種類の計測情報と2種類の未知変数の因果関係が式上で明快になる！

$$T(x,t) = \sum_{n=0}^{\infty} A_n(x) e^{-\lambda_n t} - \int_0^t G(t-s, x, 0) f(s) ds + \int_0^t G(t-s, x, l) g(s) ds$$

計測温度(B.C.) I.C.(未知変数)① 内壁のB.C.(未知変数)② 計測熱流束値(B.C.)

$$A_0(x) = \frac{1}{l} \int_0^l T_0(y) dy \quad A_n(x) = \frac{2}{l} \int_0^l T_0(y) \cos \frac{n\pi}{l} y dy \cdot \cos \frac{n\pi}{l} x$$

$$\lambda_n = \alpha \frac{n^2 \pi^2}{l^2} \quad G(t, x, y) = \frac{2}{l} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\lambda_n t} \cos \frac{n\pi}{l} x \cos \frac{n\pi}{l} y + \frac{1}{l}$$

図3 伝熱逆問題の数学的手法の基本解の表現 (B.C.は境界条件、I.C.は初期条件を示す)

図4は溶鋼鍋の概略、図5は溶鋼鍋の外壁温度の計測事例です。外壁温度から熱流束を放射伝熱と自然対流伝熱の和として計算できるので、高炉で使った同一の数学的手法をそのまま適用し、溶鋼鍋を構成する耐火物の内部温度が計算できます。装置材料の内部温度情報が活用できるので、これまで外壁温度情報だけから判断していた耐火物の溶損状態の診断能を革新的に向上させる可能性を有しています。また、溶鋼鍋以外にも、設備の異常診断等、さまざまな技術の出口の拡大が期待できます。図6は、図4の点Aの位置の煉瓦内部に、試験的に熱電対を数カ所設置し、逆問題計算結果の精度を検証した事例です。計算結果は、製造現場が満足できるレベルで実測値に合致しています。

数学的手法に求める精度は課題の性格に大きく依存します。共同研究成果の打倒な評価と終了時期を判断するために、数学モデルに求める精度を産学間で共有しておくことが大切だと考えています。

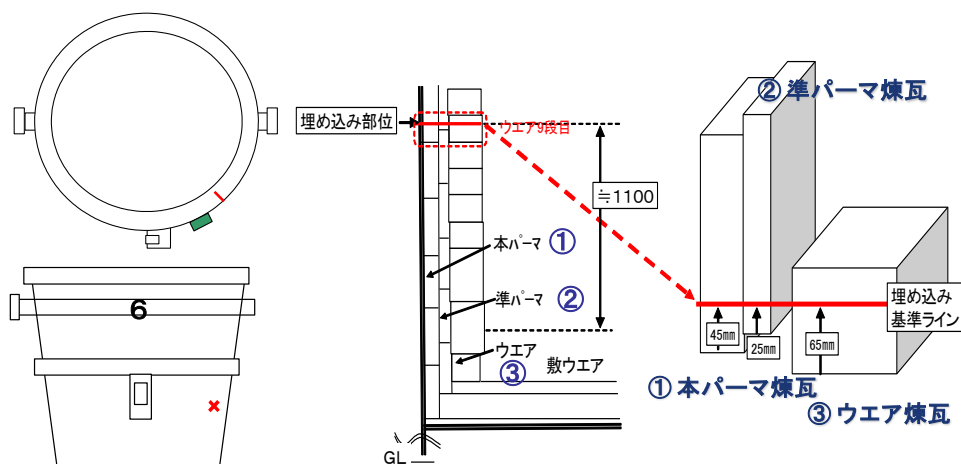


図4 溶鋼鍋と逆問題解析の妥当性検証試験における熱電対設置の概略図

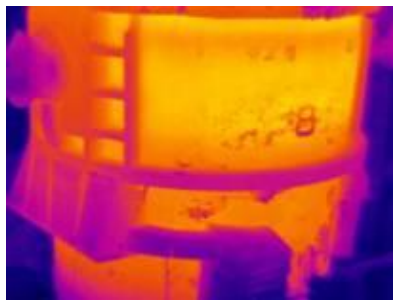


図5 赤外線サーモグラフィーによる溶鋼鍋外壁温度計測事例

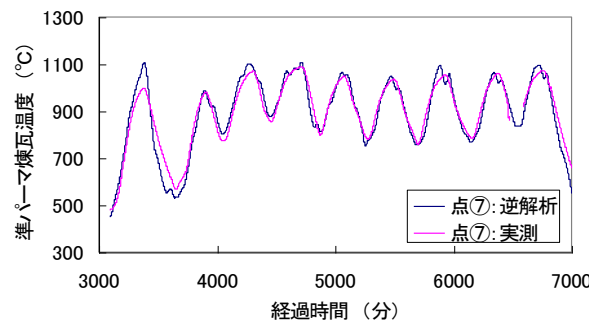


図6 伝熱逆問題の数学的手法の検証結果の一例

2. 数学と物質・材料の連携、更なる数学連携の展開について

金属材料のミクロスコピックなスケールで観察される転位と呼ばれている格子欠陥を事例にして、数学と物質・材料の数学連携の展開の活動内容について紹介します。

我々がマクロスケールで計測する強度・延性等の材料の機械的性質は、様々な形状や方位を有する結晶粒の集合体（多結晶）に弾性限界を超える歪を加えた際に引き起こされる転位により決定されます。十分に焼鈍された金属材料においても転位は $10^6 \sim 10^8 \text{ cm/cm}^3$ 程度存在し、変形を加えるとこれらが降伏点近傍で急激に増大し、結晶粒界に転位が蓄積し、その後、転位がつくる歪場が粒界を伝播して材料全体の变形へと発展していきます。これが降伏現象と呼ばれるもので、実用構造部材設計においては、最高強度に対する降伏強度比は、その鋼材の弾性変形挙動を制御することになり、免震構造設計などにおいて非常に重要なパラメータです。また降伏してから材料の破壊に至るまでの材料中で起きている現象はすべて転位の運動に起因するものであり、材料の疲労変形時の高寿命化等、材料設計における転位運動の統一的な理解と制御は構造材料設計における喫緊の課題の一つです。

図7は、転位という物理現象を、スケールの異なる視野で階層的にとらえた様子を示します。現在、転位の原子配列の乱れを従来の二次元投影像から三次元実像として可視化しようとする方

向にナノスケール計測技術が研究されていますが、その微視的知見とマクロな材料設計との間にはまだ距離があります。そこで、メソスケールというべきバルク試料を直接観察できる走査電子顕微鏡（SEM）による転位の直接観察が期待されていました。そして近年、表面形状観察が主体であったSEMを活用して、TEMのようにブラッグ反射を起こした反射電子を検出する手法で、個々の転位を分離識別できる観察技術が開発されつつあり、メソスケールの計測結果からマクロな機械的特性を予測するための技術的課題の検討が可能となりました。一方、計算科学分野では、材料の応力と歪の関係に代表されるマクロスケールな機械的特性をマルチスケールで理解するため、様々な階層での計算科学を用いた研究が進められていますが、階層毎に計算前提が異なるため、転位密度を共通記述因子とする段階に止まっており、階層を跨ぎ計測結果を同時に予測できるまでには至っていません。

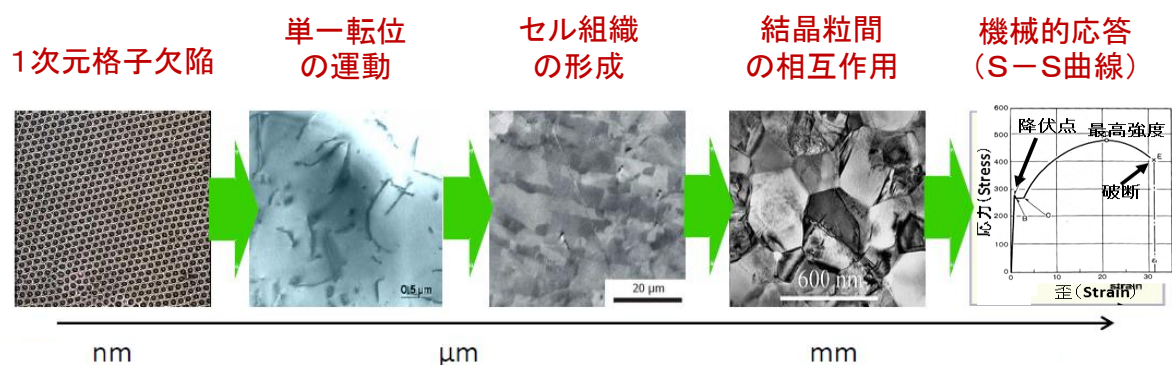


図7 転位の空間階層性を示す概念図

このような現状を打破するアプローチとして、転位運動の空間階層間関係を支配する潜在因子を抽出することを将来目標にすることを念頭におき、まずは、転位運動の動作原理の本質的な原理を数学的に捉える取組みに着手しました。

図8は、鉄の典型的な結晶格子であるBCC（体心立方）格子のらせん転位の運動に関する材料研究者による観察事実を示しています。同図は、転位により原子が動く方向（ $[1,1,1]$ 方向のバーガズベクトル）を法線とする或る平面である $(1,1,1)$ 面に結晶格子を射影した結果で、原子位置を○、△、□で表示し、各々、 0 、 $b/3$ 、 $2b/3$ の数値が記載されています。これら数値は、射影面の法線方向の原子位置座標を表し、原子は3層構造で周期的に配置されます。ここで、 b は結晶格子長を表します。同図の赤い矢印の方向に転位が進むとしますと、A、Bで記載された2種類のサーキット上を転位線が通過します。サーキットAは $0 \rightarrow 2b/3 \rightarrow b/3$ 、サーキットBは $0 \rightarrow b/3 \rightarrow 2b/3$ に配置された原子周りのループです。サーキットAにあった転位線がサーキットBに入ると、サーキットBの原子配列がサーキットAに変化し、転位線がサーキットBを出ると、再びサーキットBの原子配列に戻ることを、当観察事実主張しています^[7]。

転位がこれら事実を満足する公式を導出するために、2015年2月に東京大学大学院数理科学研究科でスタディグループを開催し、得られた結果を図9に示します。この公式が意味することは、転位芯を原点（ x_0 とする）に、転位線の進行方向を x 軸にとり、各原子と x 軸のなす反時計周り

1. The Burgers vector is $\frac{1}{2}[111]$.
2. A dislocation starts at a boundary.
3. The dislocation is more likely to occur at a circuit around a circuit B rather than a circuit A.
4. When the dislocation line is in the triangle B, the arrangement of atoms of the circuit B changes A.
5. After the dislocation line passes B, the arrangement of atoms becomes B.

加藤雅治, 入門転位論(1998), 裳華房

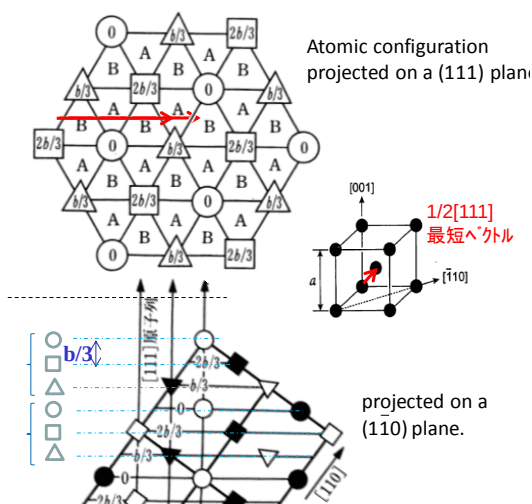


図8 BCC結晶格子のらせん転位運動に関する観察事実

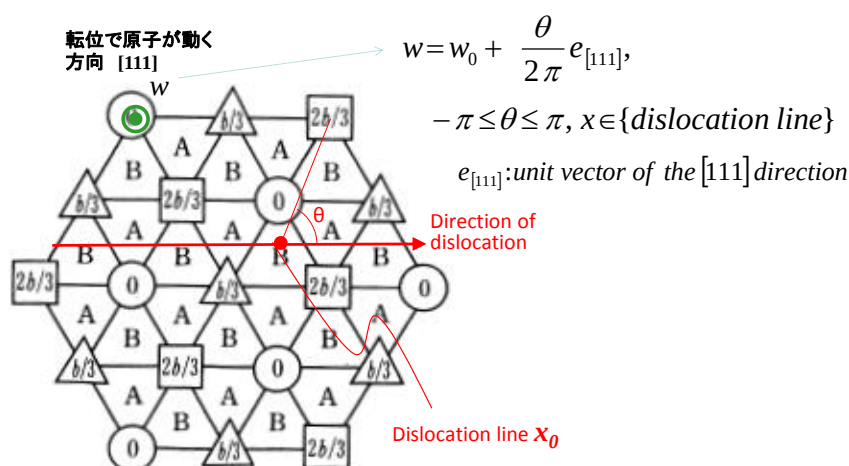


図9 上述(図8)のすべての観察事実を満たすらせん転位運動の公式

The arrangement of atoms of the circuit B in CCW: 0 -> b/3 -> 2b/3
The arrangement of B The arrangement of A The arrangement of B

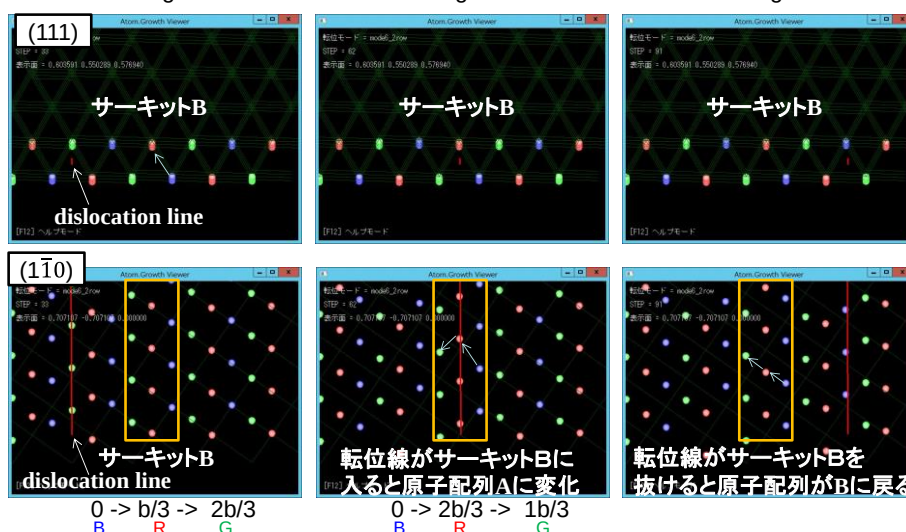


図10 コンピュータシミュレーションによる公式(図9)の妥当性の検証事例

の角を θ とすると、転位による原子がバーガーズベクトル方向に動く距離は x_0 と θ のみで決まり、 S^1 関数で記述されることを表しています。BCC結晶格子の原子模型をコンピュータで作成し、この公式のルールで原子を動かしたときのシミュレーション結果を図10に示します。サーキットAにあった転位線がサーキットBに入ると、サーキットBの原子配列がサーキットAに変化し、転位線がサーキットBを出ると、再びサーキットBの原子配列に戻っていることを確認でき、公式の妥当性を検証するものだと考えます。

次に、図8の公式の一般化について九大IMI・東大数理科学の共催によるSGW2015(2015.7/29~8/4)で議論し得られた結果を以下に紹介します。

(111)面への射影によるBCC結晶の原子配列を P と表記し、 P を底空間として、底空間上の各原子に S^1 ファイバーを、図11のように設定します。らせん転位とは、底空間での特異点である転位芯周りのループがなす基本群 π_1 が S^1 ファイバーに作用し、 S^1 ファイバー上の原子配列を図8の公式に従い $[-1,+1]$ の範囲で置き換えるものとして以下のように表せます。

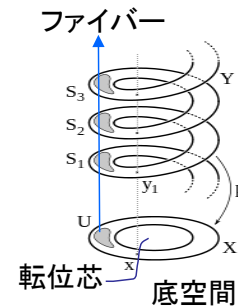


図11 底空間と S^1 ファイバー

$$\begin{aligned} \{\pi_1(P) \rightarrow \text{Aut}(L)\} &= \text{Hom}(\pi_1(P), S^1) \\ &\cong H^1(P, \mathbb{R}) \supset S^1 \end{aligned}$$

上式はバーガーズベクトルの物理的概念を数学により一般化した結果と考えることができます。

3. 数学イノベーション構想

数学の互いに相異なる分野の連携を活性化し、図12に示す分野間の階層構造を数学的に繋げるために、数学世界上でメゾな系を新たに設定して数学理論を創出し、計算機と実験の間に数学を明示的に介在させ創出される新しい技術概念、特に、現実世界でのミクロな系の諸現象を制御する技術を、科学技術イノベーションの指導原理として工学や産業等に浸透させ、共著論文出版にとどまらず検証実験や競争的資金の共同申請等の形で数理モデルの成果を顕在化させることが、数学を科学・技術の共通言語にして異分野融合を目指す私共の数学連携チームが目指すゴールです。

抽象化された数学世界上で、ミクロな系とマクロな系を繋ぐメゾな系を新たに設定し、ハミルトン系の確率過程を考え、流体力学極限を適用し偏微分方程式の導出を図ります。偏微分方程式が表すマクロな系の大域的性質とミクロな系で設定した決定論的モデルの局所的法則の因果関係を解析することで、複数の粒子間の相互作用効果を大域的に明示化することが可能になります。ここで、流体力学極限は一般化されたミクロとマクロを繋ぐ強力な手法ですが、現時点では、物理的に重要な全ての系に適用できるわけではなく、ミクロな系の決定論的なモデル方程式の形に依存します。そこで、ミクロな系の決定論的モデル方程式の解が描く軌道である有理力学系に着目し、そのトロピカル極限として決定されるオートマタ半群を数理モデルの骨格とした分類を行うことで、現実世界でよく知られているミクロな系の方程式を含む方程式類の集合のなかから解析の比較的容易なものを選び、元の方程式の骨格構造は保ちつつもそれを近似したものを用いて、

上述したハミルトン系流体力学極限を実行可能にするような「同値類からのモデル選択」に関する研究を行います。一方、オートマトンのグラフ構造をトロピカル多様体の観点から代数幾何学的に調べ、さらに、オートマタ半群がN進系の数列に繰り返し作用することで観察される数列のパターンを代数的に調べることでオートマトンの代数的構造の理解を深化させ、現実世界で観察される有理力学系の時系列データの骨格にあるオートマトン構造を探る研究を行い、数学各分野の連携の活性化を促進することが可能になっていくと考えます。

これにより、現実世界で考えていただけないような斬新な発想が数理モデリングにブレークスルーをもたらす機会を増大させ、さらには、諸科学・産業の問題との接点をもとに、数学の互いに相異なる分野の横断的な研究を創始することで、関係する若手数学者の育成にも繋がります。上述のメゾな系での数学理論構築の過程で提案される数学的アイデアをアルゴリズム化し、企業研究者が適宜コンピュータに実装し数学者にフィードバックすることで新たな数学的発想を引き出し、異分野融合を目指す数学連携チームが現場・社会を動かし変えるとともに、新たな数学研究領域が創出される「数学イノベーション構想」具現化を図っていきたいと考えます。

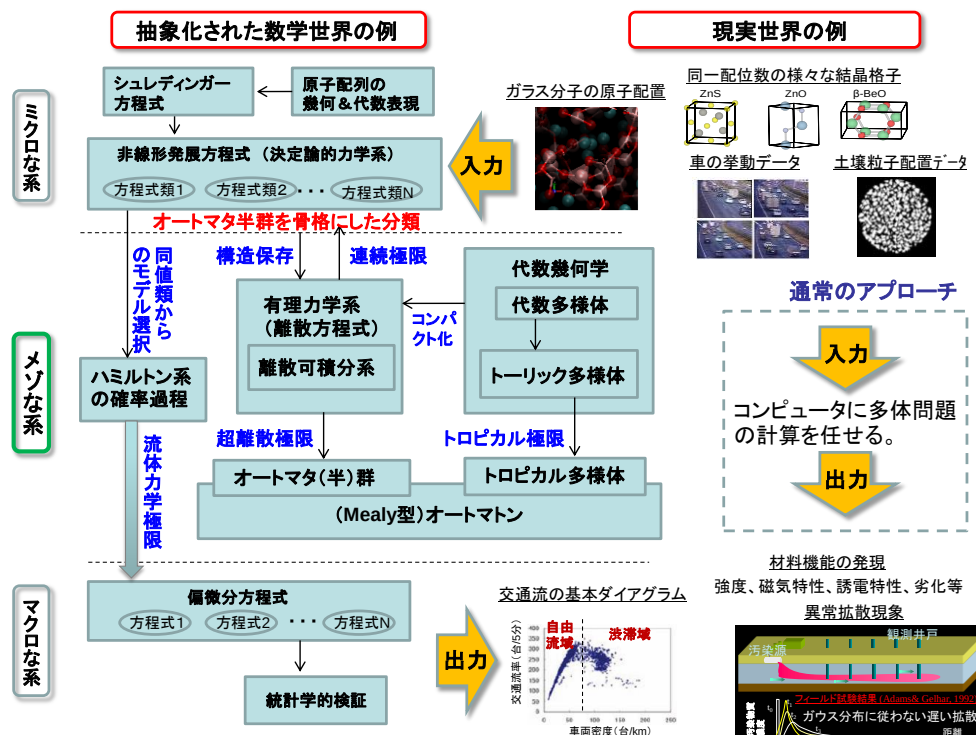


図 1 2 抽象的な数学世界上での数理モデリングと現実世界への変換

参考文献

[1]中川淳一,合原一幸, リカレンスプロットによる高炉の非定常解析,信学論(A), Vol.J187-A, No.10, pp366-381 (2004)

[2] 中川淳一，文部科学省科学技術政策研究所編著， 数学イノベーション，第8章 製造現場における数学活用，工業調査会（2007）

[3]J. V. Beck, “Nonlinear estimation applied to the nonlinear inverse heat conduction problem”, Int. J. Heat Mass Transfer, vol13, pp703-716 (1970)

[4]Y. Wang, J. Cheng, M. Yamamoto, J. Nakagawa: “A numerical method for solving the inverse heat conduction problem without initial value,” to appear in Inverse Problems in Science and Engineering (2010)

[5] J. Nakagawa, M. Yamamoto: “Bilateral practice of industrial mathematics in steel making process” , Journal of Math-for-industry, Vol.1 (2009B-9), pp.157-163

[6] 独立行政法人 新エネルギー・産業技術総合開発機構 エネルギー使用合理化技術戦略的開発 エネルギー有効利用基盤技術先導研究開発，「固定エネルギー削減のための非定常伝熱逆問題センシング技術の研究開発」平成18年度 報告書

[7] 加藤雅治，入門転位論，裳華房(1998)