データ同化との融合によるフェーズフィールド法の進展

Progress in phase-field method integrated with data assimilation

山中 晃徳

Akinori YAMANAKA

1. はじめに

アルミニウム合金やマグネシウム合金などの軽金属材料は、社会の省エネルギー化を実現するために必要不可欠な材料である。一方で、日本では少子高齢化が進み労働人口が減少するなか、従来よりも効率的に金属材料および金属製品を設計・開発・製造することが求められている。本連載講座のテーマである計算材料学や計算固体力学に基づく数値シミュレーションは、材料の研究開発を効率化するために今後ますます必要となる技術である。

本連載講座でも解説するように、金属材料の組織形成過程や変形挙動の数値シミュレーション方法として、電子・原子・分子のスケールでは第一原理計算や分子動力学計算が使用されている。ミクロスケールでは、モンテカルロ法やセルオートマトン法に加えて、フェーズフィールド法が盛んに研究されている。また、メゾスケールからマクロスケールでは結晶塑性理論や弾塑性理論に基づく有限要素法が広く使用されている。このような計算材料学や計算固体力学に基づく数値シミュレーションの研究は、最近になってさらに注目を集めている。その理由は、2000年初頭に米国において掲げられたICME構想、その後の2011年にマテリアルズ・ゲノム・イニシアティブ (Materials Genome Initiative: MGI) と名づけられた材料研究のガイドラインが策定されたことであると思われる¹⁾。MGIは、材料開発の短期化・低コスト化のために必要な実験・計算技術の発展に加えて、米国ならびに世界中にある材料データを基礎にデータ科学を活用して、従来の材料開発期間を大幅に短縮することを目指している。このMGIの策定を契機に、最近では計算材料学に加えてデータ科学を活用した数値シミュレーションによる材料開発のための基礎研究が世界的に活発である。

本講座では、著者がこれまで研究を進めてきたフェーズフィールド法²⁾による材料組織形成の数値シミュレーションに、データ科学的手法を適用した事例を紹介する。「データ科学」と言っても、非常に多くの理論や計算アルゴリズムがある。本稿において、そのすべてを解説することはできないが、著者は強力なデータ科学的手法のひとつであるデータ同化^{3),4)}に注目している。データ同化は、実験と理論モデ

ル (シミュレーションモデル) を統合する方法論であり、実験結果に基づきシミュレーション結果 (対象とする物理現象の予測結果) の精度向上のみならず、モデルに含まれるパラメータの逆推定やシミュレーションに適用する初期条件、境界条件の最適化を行うことができる⁴⁾。本解説では、データ同化とフェーズフィールド法の融合により、従来のフェーズフィールド法に基づく材料組織形成シミュレーションに比べて、何ができるようになるのかを紹介する。

本講座の構成は以下の通りである。はじめに、データ同化の基礎となる考え方を説明する。特に、シミュレーションに確率論を導入し、バイズの定理を利用して、シミュレーションに実験を統合する意味を説明する。次に、著者が使用するデータ同化アルゴリズムであるアンサンブルカルマンフィルタ⁵⁾とその基礎となるカルマンフィルタ⁶⁾を説明し、データ同化がどのように機能しているのかを説明する。そして、アンサンブルカルマンフィルタをマルチフェーズフィールド法による静的再結晶シミュレーションに適用した事例を紹介する⁷⁾。なお、データ同化は、確率論や統計学の知識を必要とするため、著者も含め初学者には難しく感じる。そこで本解説では、機械工学や材料工学に関係する読者を想定して、できるだけ平易に説明することを試みた。そのため、データ同化の真の理解に必要な数学的背景や定式の詳細は不十分であることは否めない。フェーズフィールド法の理論についても簡単に触れるのみとした。読者にとって不足する内容については、過去の優れた文献を参照頂きたい。データ同化に関しては、文献^{3),4),8)~11)}を推薦したい。フェーズフィールド法については、いくつかの著書^{12),13)}や本連載講座を含む解説論文^{14)~16)}がすでに出版されているので、参照して頂きたい。また、フェーズフィールド法へのデータ同化の適用についても、最近出版された論文にいくつかの報告^{19)~21)}がある。

2. データ同化の基礎

データ同化の各種手法は、非逐次データ同化と逐次データ同化の2つに大きく分類される。非逐次データ同化は、実験データ (データ同化の分野では、観測データと呼ばれることも多い) の全体を捉えて、その実験データを最もよく再現

6

するモデルの初期値やパラメータをすることができる。非逐次データ同化の代表的なアルゴリズムとしては、3次元変分 (3DVar) 法や4次元変分 (4DVar) 法がある。次に述べる逐次データ同化に比べて、計算コストが小さいため、計算規模が大きいシミュレーションにも適用することができる。その一方で、シミュレーションモデルへの適用 (実装) には、高度な数学的枠組みを利用するため、初学者には困難を伴うことが多い。材料工学への4次元変分法の適用とその有効性については、文献17) に詳しく解説されている。

他方で、本解説で適用事例を紹介する逐次データ同化は、時系列の実験データを逐次的にシミュレーションモデルに統合する。これにより、実験データを再現するシミュレーション結果を得るのみならず、初期条件・境界条件の最適化、さらにはパラメータの逆推定を行うことができる。逐次データ同化の代表的なアルゴリズムには、線形なシミュレーションモデルに適用できるカルマンフィルタや非線形なシミュレーションモデルに適用できるアンサンブルカルマンフィルタ、粒子フィルタなどがある。逐次データ同化は、計算規模が大きくなると非常に大きな計算コストが必要となる。しかしながら、非逐次データ同化に比べて、シミュレーションモデルへの実装が容易という長所がある。この長所が、著者が注目し、本解説において読者に紹介する理由である。

データ同化を適用したシミュレーションと従来のシミュレーションの大きな違いの一つは、後者では一つの初期条件に対して、シミュレーション結果は一意に決まる。すなわち、決定論的なシミュレーションである。それに対して、データ同化を適用したシミュレーションでは、シミュレーション結果が一意に定まらず、幅を持った確率分布として与えられる。この確率分布の幅は、シミュレーション結果の不確かさを表す。シミュレーションモデルは、対象とする自然現象の本質を捉えたモデルであり、決してその現象を完全に再現することはない。すなわち、シミュレーションモデルには不完全さがある。さらに、シミュレーション結果は、初期条件・境界条件やパラメータにも依存し、これらに起因する不確かさも含んでいる。データ同化では、そうした不完全さや不確かさを含めたシミュレーション結果を表す確率分布の時間変化を追跡する。また、シミュレーション結果を確率分布で表現することにより、実験データにシミュレーション結果を近づけるということが可能となる。このとき、逐次データ同化は、シミュレーション結果を実験データにどれくらい近づけるべきかを提示してくれる。これを利用して、実験データが得られるたびに、シミュレーション結果を修正する。結果的に実験データを再現するシミュレーション結果を得て、適切な初期条件・境界条件およびパラメータを逆推定することができる。次節では、データ同化において、実験データに近づきようにシミュレーション結果を修正する原理となるベイズの定理を説明する。

2.1 ベイズの定理

ベイズの定理は、確率の乗法定理から導かれる。確率の乗法定理は、事象 a と事象 b に対して、 a と b が同時に生じる確率、すなわち同時確率 $P(a, b)$ が次式で与えられることを表す。

$$P(a, b) = P(a|b)P(b) \quad (1)$$

ここで、 $P(a|b)$ は事象 b が生じるもとで事象 a が生じる条件つき確率を表す。確率の乗法定理は、事象 a と事象 b が入れ替わっても成立するので、式(1)は次式のように書き換えることができる。

$$P(b, a) = P(b|a)P(a) \quad (2)$$

式(1)と式(2)より、次式に示すベイズの定理²²⁾が導かれる。

$$P(b|a) = \frac{P(a|b)P(b)}{P(a)} \quad (3)$$

ベイズの定理は、確率だけではなく確率密度関数 (Probability Density Function: PDF) についても成立する。 b をシミュレーションモデルで予測する状態変数を表す確率変数 x とし、 a をシミュレーションモデルで予測された状態に対応する実験データを表す確率変数 y とすると、式(3)は次式のように表される。

$$p(x|y) = \frac{p(y|x)p(x)}{p(y)} \quad (4)$$

ここで、 $p(x)$ はシミュレーションモデルにより予測された状態のPDFであり、実験データが得られる前に知り得た状態に関する事前情報を表すPDFである。これを事前分布 (Prior PDF) と呼ぶ。 $p(y|x)$ は、実験データがシミュレーションモデルで予測された状態とどれくらい近しいかを表すPDFであり、尤度 (Likelihood) と呼ばれる。 $p(x|y)$ は、実験データが得られた後に、その実験データを踏まえて予測された状態を表すPDFであり、事後分布 (Posterior PDF) と呼ばれる。 $p(y)$ は、実験データに関するPDFを表すが、実験データはすでに測定されているので定数と考えることができる。したがって、ベイズの定理は次式のように表すことができる。

$$p(x|y) \propto p(y|x)p(x) \quad (5)$$

逐次データ同化において、式(5)の意味は次の通りである：シミュレーションモデルの不完全さや初期条件・境界条件、パラメータの不確かさを含む、ある時刻でのシミュレーション結果を表す確率密度関数 (事前分布; Prior PDF) と実験データを表す確率密度関数 (尤度; Likelihood) の掛け算を計算することで、実験データを反映するように修正されたシミュレーション結果を表す確率密度関数 (事後分布; Posterior PDF) を得ることができる。得られた事後分布の平均値を算出すれば、シミュレーションモデルで予測する状態のうち最も確率として高い状態を知ることができる。事後分布の分散 (または共分散) を評価すれば、実験データを反映したうえでのシミュレーション結果の不確かさを評価することができる。次節では、簡単な1次元のPDFを用いて、データ同化においてベイズの定理がどのように機能するかを説明する。

2.2 確率密度関数

PDFには、ベルヌイ分布やベータ分布など様々な分布があるが、データ同化ではガウス分布が多用される。確率変数 x

が、1次元で表される場合、ガウス分布は次式で与えられる。

$$p(\mathbf{x}|\mu, \sigma) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{(\mathbf{x}-\mu)^2}{2\sigma^2}\right] \quad (6)$$

ここで、 σ^2 は式(6)で与えられるPDFの分散であり、 $\sqrt{\sigma^2}=\sigma$ は標準偏差である。 μ は、式(6)で与えられるPDFの期待値 $E(p(\mathbf{x}|\mu, \sigma))$ にあたる平均値である。以後、確率変数 $\mathbf{x}$ が平均値 μ 、分散 σ^2 のガウス分布に従うとき、 $\mathbf{x}=N(\mu, \sigma^2)$ と表記する。

式(6)を用いて、ベイズの定理の意味を詳しく説明するための例として、材料の弾性変形で生じる応力 S を予測するシミュレーションモデルを考える。その応力予測モデルは、ある時刻 t において、応力の予測値を10MPaと予測していたとする。一方で、その予測値のばらつきが標準偏差として0.8MPaとする。したがって、応力予測モデルの予測値を、平均値 $\mu_{\text{prior}}=10$ 、分散 $\sigma_{\text{prior}}^2=0.64$ のガウス分布で与えるならば、 $S=N(\mu_{\text{prior}}, \sigma_{\text{prior}}^2)=N(10, 0.8^2)$ と表される。式(5)のベイズの定理において、これは事前分布 $p(\mathbf{x})$ に対応する。一方で、同時刻において実験で測定された応力は12MPaであり、その測定誤差が標準偏差で0.5MPaであったとする。この実験データもガウス分布で表されると仮定すれば、それは式(5)の尤度に対応し、 $p(\mathbf{y}|\mathbf{x})=N(\mu_{\text{obs}}, \sigma_{\text{obs}}^2)=N(12, 0.5^2)$ のように表される。このとき、ベイズの定理によれば、事後分布すなわち応力予測モデルの予測値の修正は、次式で計算される。

$$p(\mathbf{x}|\mathbf{y}) \propto p(\mathbf{y}|\mathbf{x})p(\mathbf{x}) = N(\mu_{\text{prior}}, \sigma_{\text{prior}}^2)N(\mu_{\text{obs}}, \sigma_{\text{obs}}^2) \quad (7)$$

2つのガウス分布の積はガウス分布となる¹⁸⁾ため、事後分布は次式のように表される。

$$p(\mathbf{x}|\mathbf{y}) \propto \frac{1}{\sigma_{\text{post}}\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{(\mathbf{x}-\mu_{\text{post}})^2}{2\sigma_{\text{post}}^2}\right] \quad (8)$$

ここで、式(8)の事後分布の平均値 μ_{post} と標準偏差 σ_{post} は、それぞれ次式で与えられる⁹⁾。

$$\mu_{\text{post}} = \frac{\sigma_{\text{prior}}^2 \mu_{\text{obs}} + \sigma_{\text{obs}}^2 \mu_{\text{prior}}}{\sigma_{\text{prior}}^2 + \sigma_{\text{obs}}^2} \quad (9)$$

$$\sigma_{\text{post}} = \frac{\sigma_{\text{prior}}^2 \sigma_{\text{obs}}^2}{\sigma_{\text{prior}}^2 + \sigma_{\text{obs}}^2} \quad (10)$$

図1に、事前分布と尤度、それらの積で表される事後分布を図示する。事後分布は、事前分布よりも標準偏差が小さい、すなわち不確かさが小さい尤度の方に近づくように、移動することがわかる。その移動量を算出するために、式(9)で示した事後分布の平均値を次式のように書き換える。

$$\mu_{\text{post}} = \left(\frac{\sigma_{\text{prior}}^2}{\sigma_{\text{prior}}^2 + \sigma_{\text{obs}}^2}\right) \mu_{\text{obs}} + \left(\frac{\sigma_{\text{obs}}^2}{\sigma_{\text{prior}}^2 + \sigma_{\text{obs}}^2}\right) \mu_{\text{prior}} \quad (11)$$

ここで、式(11)右辺の括弧内を次式で定義する。

$$K = \frac{\sigma_{\text{prior}}^2}{\sigma_{\text{prior}}^2 + \sigma_{\text{obs}}^2} \quad (12)$$

図1 事前分布と尤度およびベイズの定理で計算される事後分布

式(12)を用いると、式(11)は次式で表される。

$$\mu_{\text{post}} = K\mu_{\text{obs}} + (1-K)\mu_{\text{prior}} = \mu_{\text{prior}} + K(\mu_{\text{obs}} - \mu_{\text{prior}}) \quad (13)$$

式(13)の右辺第1式より、事後分布の平均値は、事前分布の平均値と尤度の平均値の重み付け和であり、その重み係数が式(12)の K であると考えることができる。また、式(13)の右辺第2式は、事前分布の平均値（すなわちシミュレーション結果）と実験データの差に K を乗じた量が事前分布の平均値の修正量となることを意味する。さらに、事前分布の分散 σ_{prior}^2 が非常に小さい、すなわち応力予測モデルの予測精度が高いときには、 K は小さくなり、事前分布（すなわち応力予測モデルの計算結果）を信頼した事後分布が得られる。逆に、尤度の分散 σ_{obs}^2 が小さい、すなわち実験データが信頼できるときには、応力予測モデルの計算結果がより実験データに近づくように事後分布が計算される。

一方、式(10)の事後分布の分散は、 K を用いて次式のように表すことができる。

$$\sigma_{\text{post}} = \frac{\sigma_{\text{prior}}^2 \sigma_{\text{obs}}^2}{\sigma_{\text{prior}}^2 + \sigma_{\text{obs}}^2} = K\sigma_{\text{obs}}^2 = (1-K)\sigma_{\text{prior}}^2 \quad (14)$$

式(14)は、事後分布の分散、すなわち実験データを反映するように修正された予測結果の不確かさは、事前分布と尤度の両方の分散に基づき計算されることを意味する。

以上で示したように、本解説で紹介する逐次データ同化では、実験データがない時間においては、シミュレーションモデルを用いて「PDFの平均と分散の時間変化を予測」し、実験データがある時刻においては、ベイズの定理に基づきシミュレーション結果の「PDFの平均と分散の修正」を行うと考えてよい。本節では、確率変数である状態変数が1次元のスカラーの場合を例に説明したが、フェーズフィールド法などの多くのシミュレーションモデルでは、状態変数が多次元である。次節以降では、多次元の状態変数の場合に、データ同化において、どのようにしてPDFの変化を追跡するのかをカルマンフィルタとアンサンブルカルマンフィルタを例に具体的に説明する。

2.3 カルマンフィルタ

カルマンフィルタ⁶⁾は、状態変数の時間変化が線形なシミュレーションモデルで計算できる場合、すなわち行列計算で計算される場合に適用できる逐次データ同化のアルゴリズムである。

カルマンフィルタの詳細を説明するため、状態変数が次式に示す n 次元ベクトル $\mathbf{x}$ で表されることを考える。

$$\mathbf{x} = (x_1 \ x_2 \ \cdots \ x_n)^T \quad (15)$$

データ同化においては、式(15)は状態ベクトルと呼ばれる。状態ベクトル $\mathbf{x}$ がガウス分布に従うとすると、そのPDFは、式(8)と同様に次式のように表される。

$$p(\mathbf{x}|\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}) = N(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}) \\ = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^n |\boldsymbol{\Sigma}|}} \exp \left[-\frac{1}{2} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}) \right] \quad (16)$$

ここで、 $\boldsymbol{\mu}$ は次式に示す平均ベクトルである。

$$\boldsymbol{\mu} = (\mu_1 \ \mu_2 \ \cdots \ \mu_n)^T \quad (17)$$

また、 $\boldsymbol{\Sigma}$ は分散共分散行列であり、次式で表される。

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{bmatrix} \sigma_1^2 & \sigma_{12} & \cdots & \sigma_{1n} \\ \sigma_{21} & \sigma_2^2 & \cdots & \sigma_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sigma_{n1} & \sigma_{n2} & \cdots & \sigma_n^2 \end{bmatrix} \quad (18)$$

式(18)の対角成分は、式(15)の状態ベクトルの各成分の分散を表し、非対角成分は共分散、すなわち各成分間の相関を表す。

カルマンフィルタは、時刻 $t-1$ での状態ベクトル $\mathbf{x}_{t-1}$ から時刻 t での状態ベクトル $\mathbf{x}_t$ への遷移を表すシステムモデルが、次式のような行列計算で表される場合にのみ適用できる。

$$\mathbf{x}_t = \mathbf{F}\mathbf{x}_{t-1} + \mathbf{G}_t\mathbf{v}_t \quad (19)$$

ここで、 $\mathbf{F}$ は状態変数の時間変化を与える行列であり、状態遷移行列と呼ばれる。 $\mathbf{v}_t$ は、白色ノイズを表し、平均ベクトル $\mathbf{0}$ 、分散共分散行列 $\mathbf{Q}_t$ のガウス分布で与えられるとする。 $\mathbf{G}_t$ は駆動行列と呼ばれ、状態ベクトルの各要素にノイズを与えるために用いられる。式(19)右辺の $\mathbf{G}_t\mathbf{v}_t$ は、式(19)で表現される状態ベクトルを確率変数としたとき、そのPDFがガウス分布に従うように、加えられたものと考えることができる。

一方、状態変数と実験データを結びつける観測モデルを次式で定義する。

$$\mathbf{y}_t = \mathbf{H}\mathbf{x}_t + \mathbf{w}_t \quad (20)$$

ここで、 $\mathbf{y}_t$ は観測ベクトルと呼ばれ、実験データそのものを表すベクトルである。実験データは、シミュレーションで計算する状態変数と同じ次元であるとは限らない。例えば、フェーズフィールド法による組織形成シミュレーションを例にすると、多くの場合、空間分解能は実験データの方が低く、観測ベクトルの次元は状態ベクトルよりも小さい。そのため、観測行列と呼ばれる行列 $\mathbf{H}$ を導入し、状態ベクトル $\mathbf{x}_t$ の

各成分のうち観測ベクトルの各成分と比較可能な成分を抽出する。 $\mathbf{w}_t$ は、観測データの不確かさや誤差を表すノイズであり、通常は平均ベクトル $\mathbf{0}$ 、分散共分散 $\mathbf{R}_t$ のガウス分布で与えられる。データ同化では、 $\mathbf{R}_t$ を観測誤差共分散行列と呼ぶ。

2.2節で述べたように、逐次データ同化では、実験データの無い時間ではシミュレーションモデルを用いて「PDFの平均と分散の時間変化を予測」する。多次元の状態変数を考える場合には、「PDFの平均ベクトルと分散共分散行列の時間変化を予測」する。システムモデルに式(19)を用いると、PDFの平均ベクトルの時間変化は、次式で予測される。

$$\mathbf{x}_{t|t-1} = \mathbf{F}\mathbf{x}_{t-1|t-1} \quad (21)$$

ここで、 $\mathbf{x}_{t|t-1}$ は、時刻 $t-1$ までの観測データを反映したうえで予測した、時刻 t での平均ベクトルを示す。一方、分散共分散行列の予測は、次式で与えられる。

$$\mathbf{P}_{t|t-1} = \mathbf{F}\mathbf{P}_{t-1|t-1}\mathbf{F}^T + \mathbf{G}_t\mathbf{Q}_t\mathbf{G}_t^T \quad (22)$$

式(22)で与えられる分散共分散行列は、式(14)における σ_{prior}^2 に相当し、予測誤差共分散行列と呼ばれる。

実験データが存在する時刻においては、ベイズの定理に基づき事後分布の平均ベクトルと分散共分散行列を計算する。カルマンフィルタでは、事後分布の平均ベクトルは、次式で表される⁹⁾。

$$\mathbf{x}_{t|t} = \mathbf{x}_{t|t-1} + \mathbf{K}_t(\mathbf{y}_t - \mathbf{H}\mathbf{x}_{t|t-1}) = \mathbf{K}_t\mathbf{y}_t + (\mathbf{I} - \mathbf{K}_t\mathbf{H})\mathbf{x}_{t|t-1} \quad (23)$$

式(23)の右辺と式(13)式の右辺を比較すると、両者は同様の意味を示すことがわかる。カルマンフィルタでは、式(23)の $\mathbf{K}_t$ をカルマンゲインと呼び、次式で与えられる行列である。

$$\mathbf{K}_t = \mathbf{P}_{t|t-1}\mathbf{H}^T\mathbf{S}_t^{-1} \quad (24)$$

ここで、 $\mathbf{S}_t^{-1}$ は次式で表される。

$$\mathbf{S}_t = \mathbf{H}\mathbf{P}_{t|t-1}\mathbf{H}^T + \mathbf{R}_t \quad (25)$$

さらに、事後分布の共分散行列は、次式で計算される。

$$\mathbf{P}_{t|t} = (\mathbf{I} - \mathbf{K}_t\mathbf{H})\mathbf{P}_{t|t-1} \quad (26)$$

式(26)において、 $\mathbf{P}_{t|t-1}$ と $\mathbf{P}_{t|t}$ はそれぞれ式(14)における σ_{prior}^2 と $\sigma_{\text{posterior}}^2$ に対応することから、式(26)と式(14)は同様の意味を示すことがわかる。データ同化においては、式(26)で表される分散共分散行列を解析誤差共分散行列と呼ぶ。

2.4 アンサンブルカルマンフィルタ

カルマンフィルタは、状態ベクトルの時間変化が式(19)の線形なシステムモデルで表される場合でのみ適用できる。しかしながら、材料工学分野のシミュレーションモデルの多くは非線形である。非線形なシステムモデルにカルマンフィルタと同様のアルゴリズムを適用するためには、拡張カルマンフィルタ、Unscentedカルマンフィルタなどを使用する必要がある⁹⁾。本節では、非線形なシステムモデルに比較的容易に適用可能であり、精度のよいデータ同化が可能なアンサンブルカルマンフィルタ^{5), 23)~25)}を紹介する。

アンサンブルカルマンフィルタでは、システムモデルが次

式で表される場合に適用可能である。

$$\mathbf{x}_{t|t-1} = f(\mathbf{x}_{t-1|t-1}, \mathbf{v}_t) \quad (27)$$

ここで、 f は非線形なシミュレーションモデルを表す。2.3節で説明したカルマンフィルタでは、各PDFの平均ベクトルと分散共分散行列の変化をすべて行列計算により追跡できることを示した。しかしながら、アンサンブルカルマンフィルタではシミュレーションモデル f が非線形であるため、それができない。そこで、図2のようにPDFをモンテカルロ近似により表現する。すなわち、ある時刻 t での状態ベクトル $\mathbf{x}_t$ に対して、 N 個のサンプル集合 $\mathbf{X} = \{\mathbf{x}_t^i\} (i=1, 2, 3, \dots, N)$ を用意し、その疎密によってPDFを表現する。モンテカルロ近似（またはアンサンブル近似）を数式で表現すれば、次式のように表される。

$$p(\mathbf{x}_t) \equiv \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \delta(\mathbf{x}_t - \mathbf{x}_t^i) \quad (28)$$

ここで、 δ はデルタ関数である。アンサンブルカルマンフィルタでは、サンプル集合 $\mathbf{X}$ をアンサンブルと呼び、 $\mathbf{x}_t^i$ のそれぞれをアンサンブルメンバーと呼ぶ。そして、PDFを近似するアンサンブルメンバーの変化を計算することで、PDFの平均ベクトルや分散共分散行列の変化を追跡する。これは例えば、アンサンブルカルマンフィルタを適用したフェーズフィールドシミュレーションにおいては、初期条件やパラメータを種々に変更してシミュレーションを多数並列に実行し、それらの結果のヒストグラムとして、PDFの変化を表現することに等しい。

モンテカルロ近似により、時刻 $t-1$ の状態から時刻 t の状態の予測は、次式のシステムモデルで計算される。

$$\mathbf{x}_{t|t-1}^i = f(\mathbf{x}_{t-1|t-1}^i, \mathbf{v}_t^i) \quad (29)$$

ここで、 $\mathbf{x}_{t|t-1}^i$ は、時刻 $t-1$ までの観測データを反映したうえで予測した、時刻 t でのPDFを近似する i 番目アンサンブルメンバーを示す。

図2 確率密度関数のモンテカルロ近似

カルマンフィルタと同様に、アンサンブルカルマンフィルタでもPDFの平均ベクトルと分散共分散行列の変化を計算する。まず、平均ベクトルはアンサンブル平均と呼ばれる方法で計算する。たとえば、事前分布の平均ベクトルは、次式で計算される。

$$\bar{\mathbf{x}}_{t|t-1} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathbf{x}_{t|t-1}^i \quad (30)$$

また、事前分布の共分散行列、すなわち予測誤差共分散行列は、次式のように計算される。

$$\mathbf{P}_{t|t-1} = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (\mathbf{x}_{t|t-1}^i - \bar{\mathbf{x}}_{t|t-1})(\mathbf{x}_{t|t-1}^i - \bar{\mathbf{x}}_{t|t-1})^T \quad (31)$$

時刻 t での実験データを反映した事後分布は、事前分布を近似する各アンサンブルメンバーに対して、カルマンフィルタにおける式(23)と同様の計算を行うことで得られる。これをアンサンブルアップデートと呼び、次式で表される。

$$\mathbf{x}_{t|t}^i = \mathbf{x}_{t|t-1}^i + \mathbf{K}_t(\mathbf{y}_t + \bar{\mathbf{w}}_t^i - \mathbf{H}\mathbf{x}_{t|t-1}^i) \quad (32)$$

ここで、 $\mathbf{y}_t + \bar{\mathbf{w}}_t^i$ は擾乱付き観測と呼ばれる。さらに、アンサンブルカルマンフィルタにおけるカルマンゲインは、式(24)で示したカルマンフィルタでのカルマンゲインと同様に、次式で与えられる。

$$\mathbf{K}_t = \mathbf{P}_{t|t-1} \mathbf{H}^T \mathbf{S}_t^{-1} \quad (33)$$

ここで、 $\mathbf{S}_t^{-1}$ は式(25)と同じであるが、観測誤差共分散行列 $\mathbf{R}_t$ は式(31)と同様に、アンサンブルを用いて次式で計算される。

$$\mathbf{R}_t = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (\mathbf{w}_{t|t-1}^i - \bar{\mathbf{w}}_{t|t-1})(\mathbf{w}_{t|t-1}^i - \bar{\mathbf{w}}_{t|t-1})^T \quad (34)$$

そして、アンサンブルカルマンフィルタでも事後分布の分散共分散行列、すなわち解析誤差共分散行列は式(26)で計算される。

以上のように、アンサンブルカルマンフィルタでもカルマンフィルタと同様に、シミュレーションモデルで予測する状態変数を各成分とする状態ベクトル $\mathbf{x}_t$ を確率変数として、実験データがない時間においては $\mathbf{x}_t$ のPDFの平均ベクトルと分散共分散行列の時間変化を予測する。また、実験データが得られた時刻では、ベイズの定理と実験データの平均ベクトルと分散共分散行列に基づき、事後分布の平均ベクトルと分散共分散行列の変化を計算する。このとき、2.2節で説明したように、事後分布は実験データを表す尤度に近づき、かつシミュレーション結果の不確かさも減少する。

次節では、マルチフェーズフィールド法による静的再結晶の粒成長シミュレーションにアンサンブルカルマンフィルタを適用した事例を示す。

3. マルチフェーズフィールド法による静的再結晶シミュレーションへのアンサンブルカルマンフィルタの適用

3.1 粒界特性の結晶方位差依存性の推定

アルミニウム合金板の再結晶集合組織は、主に cube 方位に配向する²⁶⁾。その理由の1つとして、 $\Sigma 7$ 粒界の粒界エネルギーと粒界モビリティの異方性がある。 $\Sigma 7$ 粒界は、通常の粒界よりも粒界モビリティが大きい。したがって、cube 方位を有する再結晶粒は、圧延集合組織の主成分である S 方位を有する母相との間に $\Sigma 7$ 粒界を形成するため、S 方位の母相を急速に浸蝕して成長すると考えられている²⁶⁾。また、 $\Sigma 7$ 粒界は、通常の粒界よりも粒界エネルギーが小さい。そのため、S 方位の母相に隣接する cube 方位の再結晶粒は、粒界の曲率による駆動力が小さくなり、より成長しやすいとされている²⁶⁾。それゆえ、アルミニウム合金板の再結晶集合組織の予測には、 $\Sigma 7$ 粒界における粒界モビリティおよび粒界エネルギーの異方性が重要となる。実験により粒界の移動速度を測定することは可能であるが、駆動力を正確に測定することは困難である。よって、粒界モビリティの異方性を実験によって測定することは難しい。一方で、最近では 3DXRD²⁷⁾ や X 線トモグラフィー²⁸⁾ で、多結晶体中の結晶粒の成長をその場観察する実験技術も進展しており、こうした最先端の実験技術で得られる実験データをデータ同化によりシミュレーションに統合することが期待される。

本章では、アンサンブルカルマンフィルタをマルチフェーズフィールド法による再結晶粒成長の数値シミュレーションに適用し、再結晶粒と変形母相との間の粒界エネルギーと粒界モビリティを表すパラメータおよび変形母相の蓄積エネルギーを逆推定した数値実験（双子実験）の事例を紹介する。

3.2 双子実験

双子実験では、実際の実験データを用いたデータ同化を行うのではなく、シミュレーションで生成した計算データを仮想的な擬似実験データとみなして、データ同化を行い、データ同化アルゴリズムの適用可能性を検証する^{3), 4)}。はじめに、粒界エネルギーおよび粒界モビリティの異方性を表すパラメータの真値を仮定し、それを用いた再結晶粒成長のシミュレーションを行う。その結果として得られる、再結晶粒分布の時間変化を擬似実験データとしてデータ同化を行い、仮定したパラメータの真値を推定できるかを検証する。

3.3 静的再結晶による粒成長のマルチフェーズフィールドモデル

静的再結晶による再結晶粒の成長を表すマルチフェーズフィールドモデルを説明する。 N_{def} 個の変形母相粒と N_{rex} 個の再結晶粒の合計 $N = N_{\text{def}} + N_{\text{rex}}$ 個の結晶粒からなる多結晶組織を想定する。ある i ($i=1, 2, \dots, N$) 番目の結晶粒（以後、結晶粒 i と呼ぶ）の座標 $\mathbf{r}$ 、時刻 t における存在確率を表す秩序変数 $\eta_i(\mathbf{r}, t)$ を定義する。 η_i は、結晶粒 i の内部では $\eta_i=1$ 、結晶粒 i の外側では $\eta_i=0$ 、粒界領域では $0 < \eta_i < 1$ の範囲で滑らかに変化すると定義する。秩序変数 η_i の時間変化を計算することで、各結晶粒の成長、収縮ならびに粒界移動を解析することができる。

Fan ら²⁹⁾ が提案したマルチフェーズフィールド法では、次式に示す系の全自由エネルギーに基づき、 η_i の時間発展方程式を導出する。

$$G = \int_V \left\{ \sum_{i=1}^N \left(-\frac{\alpha}{2} \eta_i^2 + \frac{\beta}{4} \eta_i^4 \right) + \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N \gamma_{ij} \eta_i^2 \eta_j^2 \right\} + \frac{\kappa}{2} \sum_{i=1}^N (\nabla \eta_i)^2 + \sum_{i=1}^N h(\eta_i) E_i \right\} dV \quad (35)$$

ここで、式(35) 右辺の被積分関数の第1項は、係数 $\alpha, \beta, \gamma_{ij}$ が $\alpha=\beta>0$ かつ $\gamma_{ij}>\beta/2$ を満たすとき $(\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_N) = (\pm 1, 0, \dots, 0), (0, \pm 1, \dots, 0), \dots, (0, 0, \dots, \pm 1)$ で最小値をとる関数であり、各結晶粒が独立して存在するために必要な項である。第2項は、粒界領域での秩序変数の滑らかな変化を保証するために導入される勾配エネルギーである。本研究では、 $\alpha=1.0, \beta=1.0, \kappa=1.0$ とするため、時間およびエネルギーは無次元量となる。第3項は、蓄積エネルギー密度であり、 E_i は結晶粒 i の蓄積エネルギーである。本研究では、再結晶粒の蓄積エネルギーは0と仮定し、 $E_i=0$ ($i=N_{\text{def}}+1, \dots, N$) とする。 $h(\eta_i)$ は任意の座標における結晶粒 i の局所的な体積分率を表す関数であり、次式で定義される³⁰⁾。

$$h(\eta_i) = \frac{\eta_i^2}{\sum_{j=1}^N \eta_j^2} \quad (36)$$

式(35) の系の全自由エネルギーが時間とともに減少するように、再結晶粒の成長は進行すると仮定すると、秩序変数 η_i の時間変化は、次式に示す時間発展方程式を解くことで解析できる³⁰⁾。

$$\frac{\partial \eta_i}{\partial t} = -L \left\{ \frac{\eta_i^3 - \eta_i + 2\eta_i \sum_{j \neq i}^n \gamma_{ij} \eta_j^2 - \kappa \nabla^2 \eta_i}{2 \left(E_i \eta_i \sum_{j=1}^n \eta_j^2 - \eta_i \sum_{j=1}^n E_j \eta_j^2 \right) + \frac{\left(\sum_{j=1}^n \eta_j^2 \right)^2}{2}} \right\} \quad (i=1, 2, \dots, n) \quad (37)$$

ここで、 n は任意の座標 $\mathbf{r}$ において0より大きい秩序変数の個数を表す。また、 γ_{ij} は結晶粒 i と結晶粒 j の粒界エネルギーを表す。 κ は、勾配エネルギーに関するパラメータである。 E_i は、結晶粒 i 内部の均一な蓄積エネルギーの大きさを表す。 L は、座標 $\mathbf{r}$ での秩序変数の易動度であり、次式で表される³¹⁾。

$$L = \frac{\sum_{i \neq j}^n \eta_i^2 \eta_j^2 M_{ij}}{\sum_{i \neq j}^n \eta_i^2 \eta_j^2} \quad (38)$$

ここで、 M_{ij} は結晶粒 i と結晶粒 j がなす粒界のモビリティを表す。本稿で示す事例では、変形母相粒間の粒界移動は生じないと仮定し、 $1 \leq i \leq N_{\text{def}}$ かつ $1 \leq j \leq N_{\text{def}}$ のときには、 $M_{ij}=0$ と

図3 Read-Shockleyの式およびHumphreysの式でモデル化された (a) 粒界エネルギー γ_{ij} および (b) 粒界モビリティ M_{ij} の結晶方位差依存性

した。

本事例では、粒界エネルギー γ_{ij} と粒界モビリティ M_{ij} は、結晶粒 i と結晶粒 j がなす粒界での $\langle 111 \rangle$ 軸まわりの結晶方位差 $\Delta\theta_{ij, \langle 111 \rangle}$ と $\Sigma 7$ 粒界での結晶方位差とのずれ量に応じて変化する異方性があると仮定する。粒界エネルギーの結晶方位差依存性は、Read-Shockleyの式³²⁾を用いて次式のようにモデル化する。

$$\gamma_{ij} = \gamma_m \times \begin{cases} \frac{\Delta\theta_{ij, \langle 111 \rangle}}{\Delta\theta_m} \left\{ 1 - \log \left(\frac{\Delta\theta_{ij, \langle 111 \rangle}}{\Delta\theta_m} \right) \right\} & (\Delta\theta_{ij, \langle 111 \rangle} \leq \Delta\theta_m) \\ 1 - D_1 \left\{ 1 - \frac{|\Delta\theta_{ij, \langle 111 \rangle} - \Delta\theta_{\Sigma 7}|}{W_1} \left(1 - \log \left(\frac{|\Delta\theta_{ij, \langle 111 \rangle} - \Delta\theta_{\Sigma 7}|}{W_1} \right) \right) \right\} & (|\Delta\theta_{ij, \langle 111 \rangle} - \Delta\theta_{\Sigma 7}| < W_1) \\ 1 & (\Delta\theta_{ij, \langle 111 \rangle} > \Delta\theta_m \text{ and } |\Delta\theta_{ij, \langle 111 \rangle} - \Delta\theta_{\Sigma 7}| > W_1) \end{cases} \quad (39)$$

ここで、 $\Delta\theta_{\Sigma 7} = 38.21^\circ$ は $\Sigma 7$ 粒界での $\langle 111 \rangle$ 軸まわりの結晶方位差である。結晶方位差の計算方法は、文献21)を参照されたい。また、粒界モビリティの結晶方位差依存性は、Humphreysの式³³⁾を用いて、次式でモデル化する。

$$M_{ij} = M_m \times \begin{cases} 1 - \exp \left\{ -5 \left(\frac{\Delta\theta_{ij, \langle 111 \rangle}}{\Delta\theta_m} \right)^4 \right\} & (\Delta\theta_{ij, \langle 111 \rangle} \leq \Delta\theta_m) \\ 1 - D_2 \exp \left\{ -5 \left(\frac{|\Delta\theta_{ij, \langle 111 \rangle} - \Delta\theta_{\Sigma 7}|}{W_2} \right)^2 \right\} & (|\Delta\theta_{ij, \langle 111 \rangle} - \Delta\theta_{\Sigma 7}| < W_2) \\ 1 & (\Delta\theta_{ij, \langle 111 \rangle} > \Delta\theta_m \text{ and } |\Delta\theta_{ij, \langle 111 \rangle} - \Delta\theta_{\Sigma 7}| > W_2) \end{cases} \quad (40)$$

式(39)と式(40)において、 γ_m と M_m は、それぞれ結晶方位差が 15° 以上の高角粒界の粒界エネルギーと粒界モビリティを表し、 $\gamma_m = 1.5$ と $M_m = 0.5$ とする。また、 D_1 と W_1 は、それぞれ粒界エネルギーのカブの深さと幅を決定するパラメータである。 D_2 と W_2 は、それぞれ粒界モビリティのカブの高さと幅を決定するパラメータである。図3に、

$D_1 = 0.5$, $W_1 = 8^\circ$, $D_2 = 0.5$, $W_2 = 10^\circ$ とした場合の粒界エネルギーと粒界モビリティの結晶方位差依存性を図示する。

本事例では、変形母相の蓄積エネルギーは回復により時間とともに減少することを考慮し、 E_i ($i = 1, 2, \dots, N_{\text{def}}$)の時間変化を次式で表現する³⁴⁾。

$$E_i = \frac{E_i^0}{E_i^0 c t + 1} \quad (41)$$

ここで、 E_i^0 は結晶粒 i の初期の蓄積エネルギー、 c は回復による蓄積エネルギーの減少速度を決定するパラメータである。

本事例では、再結晶粒の成長の4次元的な実験データ（各結晶粒の3次元形態の時間変化）が得られた場合を想定して、アンサンブルカルマンフィルタに基づくデータ同化により、粒界エネルギーと粒界モビリティの異方性を表すパラメータである D_1 , W_1 , D_2 , W_2 と各結晶粒内の蓄積エネルギーである E_i ($i = 1, 2, \dots, N_{\text{def}}$)を逆推定できるかを検証する。

3.4 双子実験の条件

双子実験を実施するために、粒界エネルギーと粒界モビリティの異方性に関するパラメータおよび蓄積エネルギーの真値を仮定して、シミュレーションを行い、擬似実験データを作成する。擬似観測データを作成するために実施するシミュレーションの初期組織は、16個の変形母相粒と16個の再結晶粒からなる多結晶組織とする。計算領域は、 $96 \times 96 \times 96$ の規則差分格子で分割し、全方向に周期境界条件を適用する。時間増分は $\Delta t = 0.05$ 、差分格子間隔は1.0とした。再結晶粒の位置はランダムに決定する。変形母相粒と再結晶粒の初期結晶方位は、多結晶組織内に $\Sigma 7$ 粒界が存在するように設定する。Bungeのオイラー角の定義に従い、Cube方位は $(\phi_1, \phi, \phi_2) = (90^\circ, 90^\circ, 90^\circ)$ 、S方位は $(\phi_1, \phi, \phi_2) = (59^\circ, 37^\circ, 63^\circ)$ で表されるが、その粒界は正確な $\Sigma 7$ 粒界とならない。そこで、 $(\phi_1, \phi, \phi_2) = (95^\circ, 92^\circ, 94^\circ)$ と $(\phi_1, \phi, \phi_2) = (58^\circ, 35^\circ, 60^\circ)$ の結晶方位差が正確な $\Sigma 7$ 方位での結晶方位差となることを利用して、再結晶粒には $|\phi_1 - 95^\circ| < 4^\circ$, $|\phi - 92^\circ| < 4^\circ$, $|\phi_2 - 94^\circ| < 4^\circ$ を満たすオイラー角をランダムに割り当てる。変形母相粒には $|\phi_1 - 58^\circ| < 4^\circ$, $|\phi - 35^\circ| < 4^\circ$, $|\phi_2 - 60^\circ| < 4^\circ$ を満たすオイラー

6

図4 再結晶粒の成長過程の (a) 擬似実験データと (b) 双子実験においてアンサンブルカルマンフィルタにより推定された再結晶粒の成長

図5 双子実験においてアンサンブルカルマンフィルタにより推定された $\Sigma 7$ 粒界での粒界エネルギーのカブの (a) 深さを表すパラメータ D_1 , (b) 幅を表すパラメータ W_1 , 粒界モビリティのカブの (c) 高さを表すパラメータ D_2 , (d) 幅を表す W_2 の平均値とそれらの標準偏差 (不確かさ) の時間変化

図6 双子実験においてアンサンブルカルマンフィルタにより推定された結晶粒番号1～8の変形母相粒の蓄積エネルギーの時間変化

角をランダムに割り当てる。また、蓄積エネルギーの初期値 E_i^0 は、0.3以上0.6以下で結晶粒ごとにそれぞれ異なる値をランダムに設定する。また、各結晶粒での回復による蓄積エネルギーの減少を特徴づけるパラメータである c_i は0.02から0.04の範囲でランダムに設定する。粒界エネルギーと粒界モビリティの異方性に関するパラメータ D_1, D_2, W_1, W_2 の真値は、図3に示したものと同一とし、それぞれ0.5, 0.5, 8°, 10°とする。

上記の条件で実施するシミュレーションの結果を擬似実験データとし、それを成分とする観測ベクトルを定義する。本事例では、観測ベクトル $\mathbf{y}_t$ は、次式で与えられるものとする。

$$\mathbf{y}_t = (\eta_{1,1}^t \ \eta_{1,2}^t \ \cdots \ \eta_{1,N_{\text{grid}}}^t \ \cdots \ \eta_{N,1}^t \ \eta_{N,2}^t \ \cdots \ \eta_{N,N_{\text{grid}}}^t)^T \quad (42)$$

ここで、 η_{ij}^t ($i=1, 2, \dots, N, j=1, 2, \dots, N_{\text{grid}}$) は、全計算格子点数を N_{grid} としたときの時刻 t における j 番目の計算格子点の i 番目の秩序変数である。これは、実際の実験データにおける、各観測点での結晶粒の有無もしくは結晶方位と考えることができる。

一方、本事例における状態ベクトル $\mathbf{x}_t$ は、次式で与えられる。

$$\mathbf{x}_t = (\eta_{1,1}^t \ \eta_{1,2}^t \ \cdots \ \eta_{1,N_{\text{grid}}}^t \ \cdots \ \eta_{N,1}^t \ \eta_{N,2}^t \ \cdots \ \eta_{N,N_{\text{grid}}}^t \ D_1^t \ D_2^t \ W_1^t \ W_2^t \ E_1^t \ \cdots \ E_{N_{\text{def}}}^t)^T \quad (43)$$

ここで、 $D_1^t, D_2^t, W_1^t, W_2^t, E_i^t$ は、それぞれ時刻 t において、ア

ンサンプルカルマンフィルタにより推定される粒界エネルギーと粒界モビリティの異方性に関する D_1, D_2, W_1, W_2 と結晶粒での蓄積エネルギー E_i である。

アンサンプルカルマンフィルタによるデータ同化で使用するアンサンプル数、すなわち並列に実行するシミュレーションの数は $N_p=100$ とし、観測データを取り込む時間間隔は $\Delta t_{\text{samp}}=2.5$ とする。また、 D_1, D_2, W_1, W_2, E_i の初期推定値は、 N_p 個のシミュレーション、すなわち各アンサンプルメンバーで異なる。各アンサンプルメンバーでの D_1, D_2, W_1, W_2 の初期推定値は、それぞれの平均値が 0.1, 0.1, 1.0, 1.0, それぞれの初期標準偏差が 0.06, 0.06, 0.6, 0.6 のガウス分布に従うように設定する。また、 E_i の初期分布の平均値は 0.2, 標準偏差は 0.12 のガウス分布に従うように設定する。

3.5 アンサンプルカルマンフィルタによる粒界特性異方性と蓄積エネルギーの逆推定結果

図4(a)に、粒界エネルギーと粒界モビリティの異方性に関するパラメータと蓄積エネルギーの真値を用いて実施したシミュレーション結果、すなわち擬似実験データを示す。図中において、寒色で示す結晶粒が変形母相粒であり、暖色で示す結晶粒は再結晶粒を表す。再結晶粒は、変形母相粒の蓄積エネルギーを駆動力として、成長することがわかる。図4(b)に、アンサンプルカルマンフィルタにより擬似実験データを用いた双子実験の結果を示す。双子実験においては、粒界エネルギーと粒界モビリティの異方性に関するパラメータや蓄積エネルギーは、真値と大きく異なる初期値を用いた。それに関わらず、アンサンプルカルマンフィルタにより擬似実験データの再結晶の粒成長を高精度に再現する結果が得られていることがわかる。

図5に、双子実験における $D_1^t, D_2^t, W_1^t, W_2^t$ の時間変化を示す。図5の横軸は、図4(b)に示した再結晶粒成長の時間と同じであることに注意されたい。また、図5の太い実線は、事後分布の平均ベクトルに相当する各パラメータの推定値の平均値を表す。また、太い実線の周囲のハッチングの幅は、事後分布の標準偏差に相当し、各パラメータの推定値の不確かさを表す。本事例では、各パラメータの真値がこの標準偏差内に含まれていれば、アンサンプルカルマンフィルタによって各パラメータの真値を推定できていると判断する。各パラメータの推定値は、擬似実験データを反映するたびに初期値から真値に近づき、 D_1^t, D_2^t, W_1^t では $t=50$ 以降、 W_2^t では $t=30$ 以降で真値を精度よく推定できることがわかる。さらに、 $t=75$ 以降には、事後分布の標準偏差が大きくなることがわかる。これは、時間とともに再結晶粒が成長し、変形母相と再結晶粒の粒界が減少したことに起因する。

図6に、双子実験においてアンサンプルカルマンフィルタにより推定された E_i の推定結果を示す。ここで、16個の変形母相の結晶粒のうち、代表的な8個の結果を示す。図5と同様に、太い実線は、事後分布の平均ベクトルに相当する E_i の推定値の平均値を表す。太い実線の周囲のハッチングの幅は、事後分布の標準偏差に相当し、 E_i の推定値の不確かさを表す。双子実験における蓄積エネルギーの初期値は、真値よりも小さいにもかかわらず、時間の経過とともに擬似実験データを反映することで、変形母相粒の蓄積エネルギーとそ

の時間変化を推定できることがわかる。結晶粒番号3と7においては、後半に蓄積エネルギーの推定値が真値から乖離する。これは、結晶粒番号3と7の変形母相粒が、再結晶粒に浸蝕されて消滅したため、実験データを反映したとしても、必要な情報が欠落しているためである。

以上に示した双子実験の結果より、逐次データ同化を適用したマルチフェーズフィールドシミュレーションの利点は次のように総括することができる。すなわち、アンサンプルカルマンフィルタのような逐次データ同化を用いることで、再結晶粒の成長に関する時系列の実験データがあれば、最初はパラメータや変形母相粒の状態が不明であっても、実験データをマルチフェーズフィールド法による再結晶シミュレーションの結果に時々刻々と反映することで、未知パラメータや未知の状態を逆推定できる。さらには、最終的には実験データを高精度に再現するシミュレーション結果を得ることができる。これはデータ同化の適用により、従来のフェーズフィールド法やマルチフェーズフィールド法のみを用いた材料組織形成シミュレーションを飛躍的に高度化することを意味する。

4. おわりに

本解説では、データ同化との融合によるマルチフェーズフィールドシミュレーションの進展の一例を紹介した。特に、逐次データ同化アルゴリズムであるアンサンプルカルマンフィルタを、マルチフェーズフィールド法に基づく再結晶粒成長シミュレーションに適用した事例を紹介した。その結果、数値実験での例示ではあるが、再結晶粒成長の時系列データがあれば、シミュレーションに必要なパラメータの逆推定が可能であることを示した。また、パラメータの逆推定と同時に、再結晶粒の成長挙動や変形母相の状態推定も可能であり、最終的には実験データを高精度に再現することができることを示した。

本講座で説明したように、データ同化はベイズの定理をはじめとする確率論や統計学の知識を必要とするため、読者が日常的に行うシミュレーションに適用するには、困難と時間を要することも予想される。本稿が、そのような困難を少しでも減らすことにつながれば、著者にとっては望外の喜びである。また、本稿で紹介した逐次データ同化アルゴリズムであるアンサンプルカルマンフィルタでは、初期条件が異なる複数のシミュレーションを同時に実行する必要がある。シミュレーションの種類や推定したいパラメータの個数によっては、数100のアンサンプルを必要とし、非常に大きな計算リソースを必要とすることがある。その解決策として、アンサンプルカルマンフィルタをさらに発展させた局所アンサンプル変換カルマンフィルタ (Local Ensemble Transform Kalman Filter; LETKF) などの新しい逐次データ同化アルゴリズムが提案されている。LETKFは、フェーズフィールド法によるAl-Cu合金のデンドライト凝固形成のシミュレーションに適用³⁵⁾されており、今後のさらなる進展が期待される。

謝 辞

本講座において紹介した研究成果は、総合科学技術・イノ

バージョン会議SIP（戦略的イノベーション創造プログラム）「革新的構造材料（管理法人：JST）」および科学研究費補助金基盤研究（B）（課題番号：17H03425）のもと実施した成果です。ここに記して謝意を表します。

参 考 文 献

- 1) 村山光宏：まてりあ, **51** (2012), 462–466.
- 2) R. Kobayashi: *Physica D*, **63** (1994), 410–423.
- 3) 淡路敏之, 蒲地政史, 池田元美, 石川洋一：データ同化 観測・実験とモデルを融合するイノベーション, 京都大学学術出版会, (2009).
- 4) 樋口知之, 上野玄太, 中野慎也, 中村和幸, 吉田 亮：データ同化入門—次世代のシミュレーション技術—, 朝倉書店, (2011).
- 5) G. Evensen: *Physica D*, **77** (1994), 108–129.
- 6) R. E. Kalman: *J. Basic Eng.*, **82** (1960), 35–45.
- 7) 前田悠里, 山中晃徳, 佐々木健吾：日本機械学会第31回計算力学講演会講演論文集, No. 18-8 (2018), 67.
- 8) 樋口知之：予測にいかす統計モデリングの基本, 講談社, (2011).
- 9) 片山 徹：非線形カルマンフィルタ, 朝倉書店, (2011).
- 10) G. Evensen: *Data Assimilation—The Ensemble Kalman Filter*, 2nd ed., Springer, (2009).
- 11) W. Lahoz, B. Khatatov and R. Menard eds.: *Data Assimilation, Making Sense of Observation*, Springer, (2010).
- 12) 高木知弘, 山中晃徳：フェーズフィールド法—数値シミュレーションによる材料組織設計—, 養賢堂, (2012).
- 13) 小山敏幸, 高木知弘：フェーズフィールド法入門, 計算力学レクチャーシリーズ, 丸善出版, (2013).
- 14) 小山敏幸：ふえらむ, **9** (2004), 240–245, 301–305, 376–381, 497–503.
- 15) 高木知弘, 山中晃徳：塑性と加工, **54** (2013), 906–910.
- 16) 山中晃徳, 高木知弘：ふえらむ, **19** (2014), 765–774.
- 17) 小山敏幸, 塚田祐貴：ふえらむ, **23** (2019), 680–686.
- 18) S. Ito, H. Nagao, A. Yamanaka, Y. Tsukada, T. Koyama, M. Kano and J. Inoue: *Phys. Rev. E*, **94** (2016), 043307.
- 19) S. Ito, H. Nagao, T. Kasoya and J. Inoue: *Sci. Technol. Adv. Mater.*, **18** (2017), 857–869.
- 20) K. Sasaki, A. Yamanaka, S. Ito and H. Nagao: *Comput. Mater. Sci.*, **141** (2018), 141–152.
- 21) A. Yamanaka, Y. Maeda and K. Sasaki: *Mater. Des.*, **165** (2019), 107577.
- 22) 豊田秀樹：基礎からのベイズ統計学ハミルトニアンモンテカルロ法による実践の入門, 朝倉書店, (2015).
- 23) G. Evensen and P. J. van Leeuwen: *Mon. Weather Rev.*, **124** (1996), 85–96.
- 24) G. Evensen: *Mon. Weather Rev.*, **125** (1997), 1342–1354.
- 25) G. Evensen: *Ocean Dyn.*, **53** (2003), 343–367.
- 26) F. J. Humphreys and M. Hartherly: *Recrystallization and Related Annealing Phenomena*. 2nd ed., Pergamon Press. Oxford, (2004).
- 27) E. M. Lauridsen, S. Schmidt, S. F. Nielsen, L. Margulies, H. F. Poulsen and D. Juul Jensen: *Scr. Mater.*, **55** (2006), 41–56.
- 28) C. M. Hefferan, J. Lind, S. F. Li, U. Lienert, A. D. Rollett and R. M. Suter: *Acta Mater.*, **60** (2012), 4311–4318.
- 29) D. Fan and L. Q. Chen: *Acta Mater.*, **45** (1997), 611–622.
- 30) N. Moelans, A. Godfrey, Y. Zhang and D. J. Jensen: *Phys. Rev. B*, **88** (2013), 054103.
- 31) N. Moelans, B. Blanpain and P. Wollants: *Phys. Rev. B*, **78** (2008), 024113.
- 32) W. T. Read and W. Shockley: *Phys. Rev.*, **78** (1950), 275–289.
- 33) F. J. Humphreys: *Acta Mater.*, **45** (1997), 4231–4240.
- 34) American Society for Metals: *Recrystallization, Grain Growth, and Textures*, American Society for Metals, (1966).
- 35) 高橋和希, 山中晃徳：軽金属学会第136回春期大会講演概要, (2019), 307–308.