

データ同化を融合させた Phase-Field 法による 共晶反応での固液界面物性の推定

マテリアル生産科学専攻 マテリアル科学コース
材料設計・プロセス工学領域 小泉研究室 瀬口 侑右

1. 緒言

共晶反応は液相から結晶構造と組成の異なる2種以上の固相が晶出する反応であり、形成される材料組織は、層状、棒状、螺旋状などの多様な形態を持つ。材料の微細組織は力学・光学・磁気特性などに直接影響を及ぼすため、組織制御によって材料特性を向上させるためには、共晶組織の多様な形態の形成機構を理解することが求められる。形成される組織形態は、構成相の物性、界面の物性、プロセス条件などの多くの因子のバランスによって決定される。各因子の寄与については数値解析による定量的な分析が有効である。Phase-Field (PF) 法は、合金の組織形成予測の強力な数値解析手法として知られる一方で、多くのパラメータを必要とするという課題をもつ。これまで、値が不明なパラメータは、シミュレーション結果が実験結果に整合するように試行錯誤的に調整されてきた。これには長時間を要し、決定した値の信頼性も不明である。これに対して近年では、パラメータを適切に決定し PF シミュレーションによる系の状態予測の精度向上の手法としてデータ同化が注目されている[1]。同手法は、ベイズの定理に基づいてシミュレーション結果が実験観測データに近づくようにパラメータを自動的に修正することで、パラメータの逆推定と同時にシミュレーションによる状態推定の精度向上を可能とする。これまでに筆者らは、逐次データ同化の一種であるアンサンブルカルマンフィルタ (EnKF) を共晶反応の PF シミュレーションに適用し、双子実験と呼ばれる数値シミュレーション結果を疑似の実験観測データとするデータ同化にて、微細組織形成の再現とパラメータの推定に成功した[2]。双子実験で手法自体の有効性が検証されたが、実験観測データを用いたデータ同化については先行研究も存在しない。そこで本研究は、その場観察実験データから、PF シミュレーションと EnKF により、固液界面の物性および状態を逆推定する手法の確立を目的とした。

2. 方法

EnKF は、時系列の観測データを用いて、シミュレーションによる予測を逐次的に修正する手法である。Fig. 1 にその概略図を示す。EnKF はベイズ推定の一環であるため、シミュレーションの予測と観測データは、いずれも不確実性を含む確率密度関数として取り扱う。シミュレーションによる予測は、パラメータをばらつかせた複数の PF シミュレーションを同時に実行し、複数個の状態を用意する。このような複数の状態

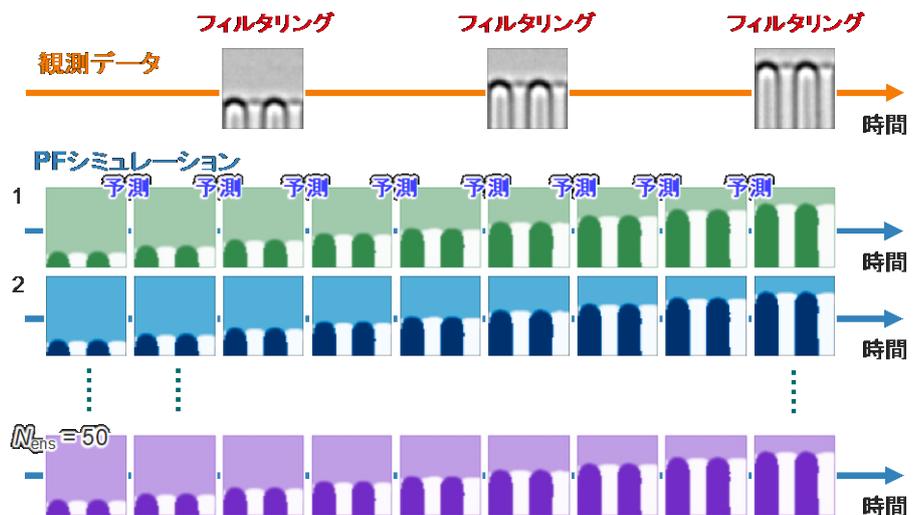


Fig. 1 EnKF の概略図。

をアンサンブルと呼び、アンサンブルの疎密でガウス分布を近似することで、シミュレーションによる予測分布を表現する。また、観測データは観測誤差を含むと仮定し、観測値が平均値、観測誤差が標準偏差のガウス分布として表現する。シミュレーションによる予測分布と観測データは、それぞれベイズの定理の事前分布と尤度に対応し、事後分布を推定結果として得る。PFシミュレーションによる状態の予測と、観測データによる修正を繰り返し行うことによって観測した組織を再現するようなパラメータと状態を逆推定する。

EnKFを適用する材料系として、共晶点温度が低くその場観察が比較的容易であること、拡散係数や界面エネルギーなどの多くのパラメータが既知であることの2つの理由から、テトラブロモメタン-ヘキサクロロエタン ($\text{CBr}_4\text{-C}_2\text{Cl}_6$) 共晶合金を選択した。界面モビリティの値が不明であるため、一方向凝固実験のその場観察像から抽出した相分布を観測データとしたEnKFによって推定した。

3. 結果

界面モビリティと相分布の推定結果の推移をFig. 2に示す。 α 相/液相界面と β 相/液相界面の界面モビリティの推定値は同一の初期値から出発し、 $t = 5$ sまでに増大したのちに、それぞれ異なる値に収束した (Fig. 2(a))。収束値はそれぞれ、 α 相/液相界面モビリティが $6 \times 10^{-9} \text{ m}^4/(\text{J} \cdot \text{s})$ 、 β 相/液相界面モビリティが $2 \times 10^{-9} \text{ m}^4/(\text{J} \cdot \text{s})$ であった。一般的な合金系の凝固PFシミュレーションでは、界面モビリティの値は 1×10^{-8} から $1 \times 10^{-11} \text{ m}^4/(\text{J} \cdot \text{s})$ のオーダーで調整されており、EnKFによって推定された2つの界面モビリティの値はどちらもこの範囲内にある。対応する相分布の推定結果は、推定初期では推定結果は観測データに対して大きくずれたが、推定が進行するに従って界面モビリティの値が修正されることで、界面形状が一致するようになった (Fig. 2(b))。

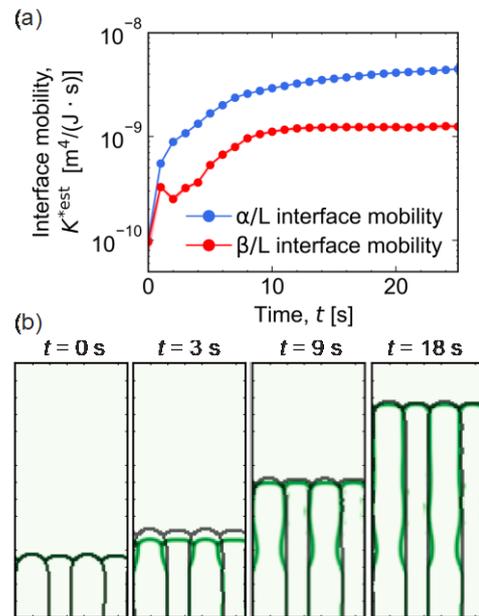


Fig. 2 EnKFによって得られた、(a) 界面モビリティと (b) 相分布から算出した界面形状の推定結果の推移。緑色の線が推定値、黒色の線が観測値である。

4. 結言

EnKFとPFシミュレーションの融合により、これまで恣意的に決定されていた界面モビリティの値が、その場観察像から逆推定可能であることを世界で初めて示すことに成功した。本研究によって手法を確立したデータ同化手法の汎用性は高く、PFモデルとその場観察像さえあれば、共晶反応に限らず他の組織形成過程にも適用可能である。そのため、界面特性の異方性や温度依存性なども観測データから推定可能になると考えられる。さらには、Additive Manufacturingなどの非平衡プロセス下の組織形成予測への応用も可能であると期待される。

5. 謝辞

この度、研究紹介記事を執筆する機会をいただき、誠にありがとうございます。日頃よりご指導くださいました、マテリアル生産科学専攻の小泉雄一郎教授、奥川将行助教に深く感謝申し上げます。また、研究遂行にあたり、東京農工大学工学研究院先端機械システム部門の山中晃徳教授、国立研究開発法人物質・材料開発機構の野本祐春博士に多くのご助言をいただきました。この場を借りて厚く御礼申し上げます。

6. 参考文献

- [1] A. Yamanaka, Y. Maeda and K. Sasaki, *Mater. Des.*, **165** (2019) 107577.
- [2] Y. Seguchi, M. Okugawa, C. Zhu, A. Yamanaka, Y. Koizumi, *Comput. Mater. Sci.*, **237** (2024) 112910.