

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 28 年 6 月 8 日現在

機関番号：12605

研究種目：挑戦的萌芽研究

研究期間：2013～2015

課題番号：25630322

研究課題名(和文) フェーズフィールド法とデータ同化による拡散相変態挙動の高精度予測の実現

研究課題名(英文) Precise prediction of diffusional phase transformation behavior by phase-field method and data assimilation

研究代表者

山中 晃徳 (Yamanaka, Akinori)

東京農工大学・工学(系)研究科(研究院)・准教授

研究者番号：50542198

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,100,000円

研究成果の概要(和文)：フェーズフィールド(PF)法は、材料中で生じるマイクロ組織形成を解析するための数値シミュレーション手法として注目されている。しかし、PFシミュレーションに用いるパラメータや初期状態は、実験結果との単純な比較により推定されてきた。本研究では、データ同化法を用いて実験データをPFシミュレーションに取り込み、パラメータの効率的推定、シミュレーションの精度向上を目指す研究を実施した。その結果、アンサンブルカルマンフィルター(EnKF)がPF法の逐次データ同化アルゴリズムとして適していることを明らかにした。さらに、双子実験によりEnKFを用いることでパラメータ推定が可能であることを実証した。

研究成果の概要(英文)：The phase-field (PF) method has attracted much attention as a numerical simulation technique for analyzing microstructure evolutions in various materials. However, parameters and initial condition used in the PF simulation have been estimated by simply comparing the simulation with the experimental results. The purpose of this study is to estimate the parameters efficiently and improve the simulation results by integrating experimental results into the PF simulation on the basis of the data assimilation (DA) method. The results of this study reveals that the ensemble Kalman filter (EnKF) is an appropriate sequential DA algorithm for the PF simulation. Furthermore, we demonstrated that a parameter used in the PF simulation can be estimated adequately using EnKF through numerical experiments called as twin experiments.

研究分野：機械材料、材料工学、フェーズフィールド法

キーワード：フェーズフィールド法 データ同化 アンサンブルカルマンフィルター 鉄鋼材料 ミクロ組織

1. 研究開始当初の背景

材料の機械的特性(強度や延性)は、材料中の結晶粒や相といったミクロ組織の体積分率、分布状態に大きく影響される。したがって、所望の機械的特性を有する材料を開発、製造するためには、材料中で生じるミクロ組織形成過程を理解し、事前に予測することが有効である。特に、材料開発コストを削減するために、ミクロ組織形成過程の高精度数値シミュレーション手法の確立が希求されている。

近年では、各種材料中で生じるミクロ組織形成過程の数値シミュレーション方法として、フェーズフィールド(PF)法が注目されている。しかしながら、如何なる数値シミュレーションでもそうであるように、PFシミュレーションの結果は、使用するパラメータの正確さや初期条件、境界条件に依存する。過去の多くの研究では、パラメータや初期・境界条件を実験結果との単純な比較により同定または推定されてきたが、これでは精度のよいシミュレーション結果を得るためには、非常に多くの実験データが必要となる。

これに対して、実験データとシミュレーションモデルを融合し、シミュレーションの予測精度向上、パラメータや初期・境界条件の効率的な推定を可能とする手法として、ベイズの定理に基づくデータ同化が活発に研究されている。データ同化は、気象学や地球科学の分野ではすでに実用化の段階にあり、たとえば毎日の天気予報の予測精度向上に貢献している。しかしながら、研究開始当初は、材料工学分野においてデータ同化を活用した研究報告は見当たらず、材料工学分野で膨大に蓄積された実験データに基づき PF シミュレーションに用いるパラメータや初期・境界条件の推定、シミュレーション精度を向上するためのデータ同化法の開発、実装と検証が有益であるとして研究を開始した。

2. 研究の目的

本研究では、鉄鋼材料で生じる固相変態のうち最も基本的かつ重要なオーステナイトフェライト()変態の PF シミュレーションを例として、ベイズの定理に基づくデータ同化法を用いて、実験データを PF シミュレーションに取り込み、PF シミュレーションに必要なパラメータ、初期条件および境界条件の効率的推定を可能とすることを目的とした。この目的を達成することで、シミュレーションに用いる PF モデルの改良、PF モデルでは本質的に再現できない核形成挙動の取り扱いに関する知見を得ることを目指した。

3. 研究の方法

本研究では、下記項目(1)~(4)を順次または平行して検討することで研究を遂行した。すなわち、(1)PF シミュレーションに最適なデータ同化アルゴリズムの選定、(2)高精度

な PF シミュレーションを実施するための合金熱力学データとの連携、(3)データ同化によるパラメータ推定の双子実験による検証、(4)GPU を用いた PF シミュレーションの高速化、(5)高精度 PF シミュレーションにむけた応力場計算について、研究を遂行した。詳細な研究方法およびその成果を次章で説明する。

4. 研究成果

3.で述べた各項目について、その方法の詳細と成果を以下に説明する。

(1) PF シミュレーションに最適なデータ同化アルゴリズムの選定

ベイズの定理に基づくデータ同化アルゴリズムは、アジョイント法に代表される非逐次データ同化と粒子フィルターや EnKF などの逐次データ同化の2種類に大別できる。本研究では、まず各アルゴリズムの長所・短所を比較検討し、PF シミュレーションに最適なアルゴリズムとして比較の実装(プログラムの構築)が簡単で、安定した推定が可能な逐次データ同化アルゴリズムの一つである EnKF を採用することにした。研究開始当初は、粒子フィルターの採用を計画していたが、良好な推定を可能とするためには、非常に大きな計算コストが必要になるとの観点から EnKF を選択した。

なお研究を推進する間に、小山ら(参考文献)による粒子フィルターの実装、伊藤ら(参考文献)によるアジョイント法の実装が発表された。

(2) 高精度な PF シミュレーションを実施するための合金熱力学データとの連携

データ同化により 変態の PF シミュレーションを高精度化するためには、変態の PF モデルが、可能な限り現象を精緻に再現できることが望ましい。そこで本研究では、計算状態図法に基づく合金熱力学データベースと連携した計算が可能な PF およびマルチフェーズフィールド(MPF)シミュレーションモデルを開発した。この研究により、当初計画していた Fe-C 合金のみならず、Fe-C-Mn 合金などの実用多元合金鋼の熱力学データベースを用いた 変態の PF および MPF シミュレーションが可能となった。

(3) データ同化によるパラメータ推定の双子実験による検証

上記(1)および(2)の研究成果を踏まえ、Fe-C-Mn 合金における 変態の PF シミュレーションへの EnKF の実装を行った。本研究は、PF シミュレーションへの EnKF 実装の最初の取り組みであるため、基礎的な1次元シミュレーションを対象とし、双子実験と呼ばれる数値実験を通じて、EnKF によりパラメータ推定精度を検討した。

双子実験では、はじめに、推定するパラメ

ータの真値を設定し、真値を用いた PF シミュレーションを実施する。そこで得られたシミュレーション結果に、実際の実験データにも含まれる誤差を想定したノイズを加えたものを擬似実験データとする。次に、推定すべきパラメータが未知であるとして、擬似実験データを用いたデータ同化を行い、真値を推定可能であるかを検証した。なお、本研究では例として、PF シミュレーションにおいてミクロ組織の成長速度を特徴づける PF モビリティを推定すべきパラメータとして双子実験を実施した。

図 1 に、データ同化に使用する擬似実験データを示す。擬似実験データは、Fe-C-Mn 合金における等温 変態の PF シミュレーションで計算された 相の時間変化に乱数により生成したノイズを付加したものである。なお、温度は 873 K で一定であり、真値を 1.29(無次元量)として PF シミュレーションを実施した。

図 2 に、本研究で構築した EnKF に基づくデータ同化により推定した PF モビリティの時間変化を示す。図中の赤線がパラメータの真値、黒線が推定値の平均値、青線が推定値の平均値 ± 標準偏差を表している。この計算結果より、PF モビリティの初期推定値を真値の 9 倍程度大きい値に設定しても、データ同化により逐次的に擬似実験データを取り込むことで、シミュレーション開始直後に推定値は真値に近づき、その後シミュレーションを続けるほど、その推定値は真値にほぼ等しくなり、非常に高精度にパラメータ推定が可能であることを実証した。

図 3 に、データ同化により PF モビリティを同定しながら計算された 相の体積分率変化を示す。図中、赤線が図 1 で示した相の体積分率変化、青線が初期推定値(真値の約 9 倍大きい値)を用いて計算された相の体積分率変化、黒線がデータ同化により推定された PF モビリティを用いて計算される相の体積分率変化の平均値を示す。擬似実験データを取り込みつつ、PF モビリティを推定しているため、計算される 相の体積分率の平均値も擬似実験データとほぼ完全に一致していることがわかる。

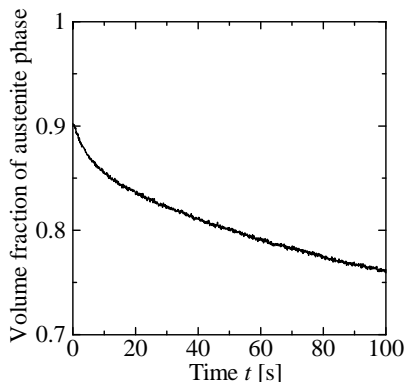


図 1 擬似実験データとして使用した 相の体積分率変化

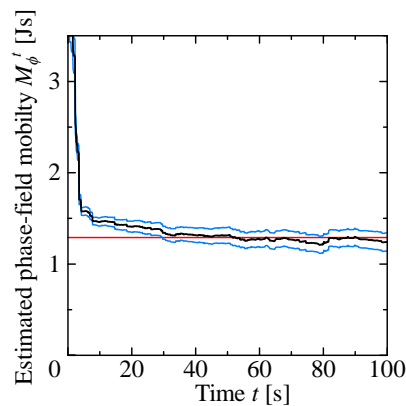


図 2 EnKF に基づくデータ同化により推定された PF モビリティの時間変化

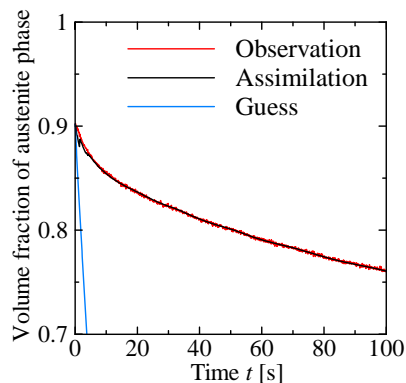


図 3 EnKF に基づくデータ同化により推定された 相の体積分率変化

(4) GPU を用いた PF シミュレーションのデータ同化の高速化

上記(3)の研究成果により、EnKF に基づくデータ同化により PF シミュレーションで使用する重要なパラメータの一つである PF モビリティを高精度に推定できることが示されたが、図 2 に示すような推定結果を得るためには、1000 以上のアンサンブルが必要となる。これは、異なる値の PF モビリティを用いたシミュレーションを 1000 以上並列して計算しなければならないことを意味する。EnKF に基づくデータ同化では、シミュレーションの解を確率密度分布関数(PDF)で表現し、PDF の時間変化(一期先予測)、更新(フィルタリング)を繰り返すため、適切な分布を有する PDF をする必要があり、結果として、EnKF によるデータ同化を行うためには、通常の 1000 倍以上の計算時間が必要となる。

そこで本研究では、Graphic Processing Unit(GPU)を用いた PF シミュレーションの計算高速化のためのプログラム開発を行った。その結果、NVIDIA 社製の GPU TESLA K20X を 2 台並列して使用することで、Fe-C 合金の連続冷却過程において生じる 変態の 3 次元 MPF シミュレーションが、従来の CPU を用いた計算の 25 倍高速化された。さらに多数の GPU を用いた MPF シミュレーションも可能

とし、東京工業大学の GPU スーパーコンピュータ-TSUBAME2.5 での超大規模・超高速計算を実現した。

以上の成果に基づき、(3)で示したデータ同化計算を GPU に実装し、高速化するためのプログラムを開発した。従来の CPU 実装では、各アンサンプルの各計算格子点での PF 計算を逐次実行していたのに対して、GPU 実装では全アンサンプルの全計算格子点での計算を同時並列に実施可能とした。すなわち、計算格子点数 100、アンサンプル数 1000 の場合、100000 格子点での PF 計算を GPU に搭載された数千個のコアを用いて同時並列に計算した。その結果、NVIDIA 社製 GPU TESLA K20X を 1 台使用するだけで、従来の 7 分の 1 の計算時間でデータ同化が可能であることを実証した。

(5)高精度 PF シミュレーションのための応力場計算

上記(1)~(4)の研究により、EnKF による PF シミュレーションのデータ同化法を構築し、双子実験による検証、GPU による高速化が可能となり、本研究の主な目的は達成された。しかしながら、擬似実験データではなく、

実際の実験データを用いたデータ同化や変態以外の固相変態に適用するためには、より複雑な現象を考慮できる PF モデルの開発も必要である。本研究では、鉄鋼材料の変態で生じる、 α/γ 界面移動、溶質原子の拡散のみを解析したが、その他にも相の形成により内部応力が発生し、相変態挙動に影響する。そこで本研究では、上記データ同化法の構築と平行して、 α/γ 変態による内部応力場発展を表現する MPF モデルを開発した。

図 4 に、応力場発展を考慮した Fe-C 合金における変態の MPF シミュレーションで得られた粒分布と応力分布を示す。本シミュレーションでは、初期温度 1000 K とし、冷却速度 1 K/s を想定した。図 4 左では、粒界面を半透明の灰色、相を色付きで示している。 α 変態において応力場は、 α 相と γ 相の格子定数の違いに起因して発生しており、 α 相には圧縮応力、 γ 相には引張応力が生じることを明らかにした。

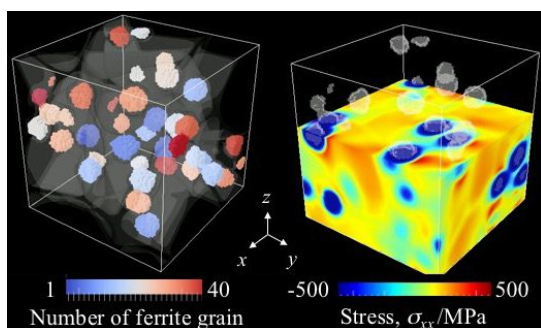


図 4 応力場発展を考慮した Fe-C 合金における変態の MPF シミュレーションで得られた相分布(左)と応力分布(右)

最後に今後の課題を述べる。

本研究により EnKF に基づく PF シミュレーションのデータ同化が可能となり、双子実験を通じて高精度なパラメータ推定が可能であることが実証された。しかしながら、双子実験では擬似実験データを使用しており、熱膨張試験や組織観察などの実験データや大きなノイズを含む実験データを用いてもデータ同化が可能か検証する必要がある。また、本研究では単一のパラメータ推定に限定されたが、原理的には複数パラメータの同時推定も可能すべきである。さらには、データ同化では、シミュレーション実施した後、時間を遡って適切な初期条件や境界条件を推定すること(フィルタリング)も可能である。PF シミュレーションにおける初期条件の推定は、新相の核形成場所や核形成速度を推定することに相当し、PF シミュレーションの本質的欠点の解決につながるため、今後の課題とする。以上の課題を解決し、より精度の良いデータ同化を実施するためには、大きな計算コストが必要となると予想され、本研究で開発した GPU 計算法が有効となる。

<参考文献>

- Toshiyuki Koyama, Yuhki Tsukada, Yuichiro Kawai, Estimation of materials parameters by data assimilation with phase-field method, Proceedings of the International Conference on Solid-Solid Phase Transformation in Inorganic Materials, 2015, pp. 831-832.
Shin-ichi Ito, Hiromichi Nagao, Akinori Yamanaka, Yuhki Tsukada, Toshiyuki Koyama, Junya Inoue, Adjoint based data assimilation for phase field model using second order information of a posterior distribution, American Physical Society March Meeting, March 16, 2016, Baltimore (USA).

5. 主な発表論文等

[雑誌論文](計 1 件)

- Akinori Yamanaka, Tomohiro Takaki, Multi-Phase-Field Analysis of Stress-strain Curve and Ferrite Grain Formation during Dynamic Strain-induced Ferrite Transformation, Key Engineering Materials, Vol. 625 2014, 81-84.
DOI:10.4028/www.scientific.net/KEM.626.81. (査読有り)

[学会発表](計 1 件)

- 佐々木健吾、山中晃徳、EnKF によるフェーズフィールド計算のデータ同化の GPU 高速化、日本計算工学会第 21 回計算工学講演会、平成 28 年 5 月 31 日-平

成 28 年 6 月 2 日、朱鷺メッセ(新潟県・新潟市)

佐々木健吾、山中晃徳、伊藤伸一、長尾大道、フェーズフィールド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実装、日本機械学会第 28 回計算力学講演会、平成 27 年 10 月 10-12 日、横浜国立大学(神奈川県・横浜市)

瀬川正仁、山中晃徳、野本祐春、熱力学データベースと連携した非平衡マルチフェーズフィールドモデルを用いた Fe-C-Mn 合金の変態シミュレーション、日本鉄鋼協会第 168 回秋季講演大会、平成 26 年 9 月 24-26 日、名古屋大学(愛知県・名古屋市)

岡本成史、山中晃徳、下川辺隆史、青木尊之、GPU スパコンを用いたフェライト変態の大規模マルチフェーズフィールドシミュレーション、日本計算工学会第 19 回計算工学講演会、平成 26 年 6 月 11-13 日、広島国際会議場(広島県・広島市)

山中晃徳、岡本成史、鉄鋼材料のミクロ組織の 3 次元形態変化マルチフェーズフィールドシミュレーション、日本鉄鋼協会第 167 回春季講演大会、平成 26 年 3 月 21-23 日、東京工業大学(東京都・目黒区)

Shingo Ishida, Akinori Yamanaka, Yuichiro Koizumi, Yunping Li, Ferrite Transformation Behavior in Deformed Austenite During Continuous Cooling: Multi-Phase-Field Simulation and Experimental Study, 5th Asia Pacific Congress on Computational Mechanics, 平成 25 年 12 月 11-14 日、シンガポール(シンガポール)

山中晃徳、多結晶粒成長における応力場発展のフェーズフィールド微視的弾性解析、日本機械学会第 26 回計算力学講演会、平成 25 年 11 月 1-3 日、佐賀大学(佐賀県・佐賀市)

Akinori Yamanaka, Multi-Phase-Field Simulation of Austenite-to-Ferrite Transformation in Steel Accelerated by Multiple-GPU Computing, The 8th Pacific Rim International Conference on Advanced Materials and Processing, 平成 25 年 8 月 4-9 日、(ハワイ・アメリカ)

山中晃徳、マルチフェーズフィールドシミュレーションの複数 GPU 計算、日本計算工学会第 18 回計算工学講演会、平成 25 年 6 月 19-21 日、東京大学(東京都・文京区)

〔その他〕

東京農工大学山中研究室ホームページ
<http://web.tuat.ac.jp/~yamanaka>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

山中 晃徳 (YAMANAKA Akinori)

東京農工大学・大学院工学研究院・准教授

研究者番号：50542198