



入門講座

インフォマティクス入門-11

材料科学に資するデータ同化

Data Assimilation Beneficial to Materials Science

長尾大道 東京大学地震研究所
Hiromichi Nagao 東京大学大学院情報理工学系研究科
准教授

1 緒言

データ同化は、数値シミュレーションモデルと観測・実験データをベイズ統計学によって融合する計算技術であり^{1,2)}、これまで主に地球科学分野で大きく発展してきた。特に、国民がほぼ毎日見ている現代の気象予報においては不可欠な技術となっており³⁾、データ同化の計算結果に基づいて発表されていると言っても過言ではない。モデルとデータの対比は、科学を推進する上での基本的な作法であることから、現在ではデータ同化は様々な分野へと浸透してきている。例えば、筆者の専門である地震分野においては、地震波伝播シミュレーションと地震観測データを同化させることにより、緊急地震速報のような地震波の到来時刻の予測などに活かす試みが続けられている⁴⁾。また、流体分野においては、流体シミュレーションと風洞実験データとの同化による航空機や自動車等の形状最適化にデータ同化が活用されている⁵⁾。本稿の多くの読者の専門分野である材料分野においても、近年、材料内部の組織成長シミュレーションと材料の実験データを融合するデータ同化研究が活発になってきており、材料特性の理解深化や新規材料創出などへの貢献が期待されている⁶⁻¹⁰⁾。

データ同化は、「逐次データ同化」と「非逐次データ同化」とに大別される。逐次データ同化は、データが得られた時点ですぐさまモデルと同化させる手法であり、これを実現する代表的な手法としては、カルマンフィルタ、粒子フィルタ、アンサンブルカルマンフィルタが挙げられる¹⁾。一方、非逐次データ同化は、一定期間蓄積されたデータをまとめてモデルと同化させる手法であり、代表的な手法として4次元変分法(あるいは、アジョイント法)が挙げられる²⁾。

図1に示す台風の進路予測の模式図を例に、データ同化を概念的に理解してみよう。2章で述べるように、時刻 t におけるシミュレーションで取り扱うすべての変数を含む状態ベクトルを \boldsymbol{x}_t 、時刻1から t までの観測データを $\boldsymbol{y}_{1:t}$ と記述する。

これらはいずれも確率変数であり、データ同化の目的は、変数の値そのものを求めることではなく、確率変数が従う確率密度関数(以下、分布)を推定することにある。現在時刻 t にお

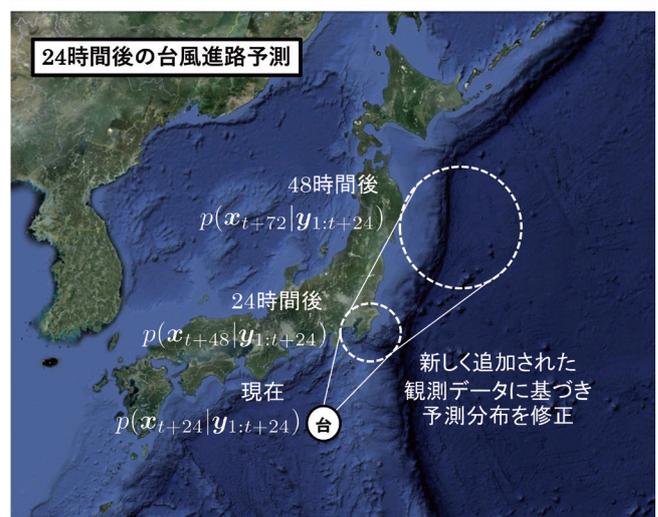
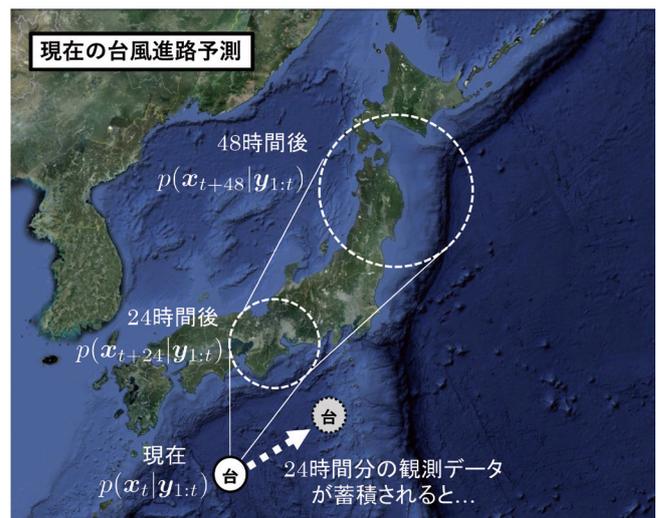


図1 台風の進路予測を例にしたデータ同化の概念的理解

いて得られている観測データは $\mathbf{y}_{1:t}$ であるから、現在の状態に関する分布は、条件付き分布の記法を用いて $p(\mathbf{x}_t | \mathbf{y}_{1:t})$ と書くことができる(確率変数 Y がある確定値を取った場合の確率変数 X に関する条件付き分布を、 $p(X|Y)$ と表す)。気象シミュレーションによって、24時間後や48時間後の状態に関する予測分布 $p(\mathbf{x}_{t+24} | \mathbf{y}_{1:t})$ や $p(\mathbf{x}_{t+48} | \mathbf{y}_{1:t})$ が得られ、これに基づいて予報の発表が行われる。状態ベクトルの要素の中には、台風の中心位置に関する変数も含まれているであろう。これに関する平均と標準偏差を予測分布から算出し、天気図に描かれるものが「予報円」である。正規分布(あるいは、ガウス分布)の場合、確率変数の値が平均 \pm 標準偏差の範囲内に入る確率は約70%であることが統計学において知られているが、予報円もまさに、台風の中心がその内部に入る確率が約70%である円と定義されている。時間が経過すると新たな観測データが追加され、例えば24時間後の時刻 $t+24$ までに得られるデータは $\mathbf{y}_{1:t+24}$ と表される。これに基づき、次々と予報を修正していく、これがデータ同化の直観的理解であると言って良い。

以降では、2章でデータ同化の基礎理論について述べた後、3章で材料内部の粒成長モデルとして多用されるフェーズフィールドモデルへのデータ同化の適用例について紹介する。

2 データ同化の基礎理論

2.1 状態空間モデル

データ同化を実行する際には、まずは次式で与えられる状態空間モデルを構築することから開始する。

$$\mathbf{x}_t = \mathbf{f}_t(\mathbf{x}_{t-1}) + \mathbf{v}_t \quad \mathbf{v}_t \sim q(\cdot) \quad (1)$$

$$\mathbf{y}_t = \mathbf{h}_t(\mathbf{x}_t) + \mathbf{w}_t \quad \mathbf{w}_t \sim r(\cdot) \quad (2)$$

式(1)はシステムモデルと呼ばれ、数値シミュレーションモデルに基づく状態ベクトル \mathbf{x}_t の離散的な時間発展を表現している。一般に、 \mathbf{x}_t はシミュレーションで用いられる変数すべてが含まれたベクトルと考えて良い。例えば、2次元空間におけるシミュレーションにおいて、離散化した空間の各グリッド (x_i, y_j) 上における物理量が温度 $\theta_{ij,t}$ および圧力 $P_{ij,t}$ である場合には、状態ベクトルを

$$\mathbf{x}_t \stackrel{\text{def}}{=} (\theta_{11,t}, \theta_{12,t}, \dots, P_{11,t}, P_{12,t}, \dots) \quad (3)$$

と定義するのが自然である('は転置を表す)。実際には、状態ベクトルの定義のしかたは式(3)に縛られる必要はなく、状態空間モデルを満たしていれば、問題を解く上で都合よく定義して良い。 \mathbf{f}_t は所与のシミュレーションモデルを表し、時刻 t における状態ベクトルに作用させることにより、次の

時刻 $t+1$ における状態ベクトルを予測することを意味している。右辺第二項の \mathbf{v}_t はシステムノイズと呼ばれ、ある分布 $q(\cdot)$ に従う確率変数である。この \mathbf{v}_t は、起こりうる現象を完全に記述する \mathbf{f}_t を与えることは一般に非常に困難であることを補う項であると解釈できる。

一方、式(2)は観測モデルと呼ばれ、シミュレーションで得られた予測結果 \mathbf{x}_t と観測データ \mathbf{y}_t の比較を表現している。一般には、シミュレーションのすべての空間グリッド上で観測データを得られることはなく、 \mathbf{y}_t の次元(ベクトルの要素数)は \mathbf{x}_t の次元よりも圧倒的に小さい。この両者を比較するために、 \mathbf{x}_t に観測演算子 \mathbf{h}_t を作用させ、 \mathbf{y}_t と比較可能な量を抽出する。また、観測データには計測誤差が含まれていることが常であることを表現するために、右辺第二項にある分布 $r(\cdot)$ に従う確率変数として観測ノイズ \mathbf{w}_t が付加されている。

ここで特に注意しておきたいこととして、状態空間モデルに登場する変数は、すべて確率変数であり、それが従う分布が存在するということである。1章で述べたように、データ同化の目的はシミュレーションとデータの両者に基づいて、各時刻における状態 \mathbf{x}_t の値ではなく、 \mathbf{x}_t が従う分布を推定することにある。分布を推定することにより、 \mathbf{x}_t の最適値だけでなく、その不確実性(誤差)評価までが自然に可能となる。

2.2 逐次データ同化における分布推定

データ同化において重要となる3つの分布について述べておく。1つ目は「(一期先) 予測分布」と呼ばれるものであり、 $p(\mathbf{x}_t | \mathbf{y}_{1:t-1})$ と表される。ここで、 $\mathbf{y}_{1:t-1}$ は時刻1から $t-1$ までのデータ集合を表す。予測分布の意味するところは、時刻 $t-1$ までのデータが与えられた下で、次の時刻 t における状態 \mathbf{x}_t をシミュレーションによって予測したときの分布となる。2つ目は「フィルタ分布」と呼ばれるものであり、 $p(\mathbf{x}_t | \mathbf{y}_{1:t})$ と表される。予測分布と比較すると、データ \mathbf{y}_t が追加されたことが分かる。すなわち、フィルタ分布は、新たに追加された時刻 t のデータ \mathbf{y}_t が与えられた下で、予測分布を修正したものとなる。3つ目は「平滑化分布」と呼ばれるものであり、 $p(\mathbf{x}_t | \mathbf{y}_{1:T})$ と表される。ここで T は t よりも大きな時刻であり、すなわち過去における状態に関する分布を意味する。

これらの3つの分布の間には、以下の関係がある。

$$p(\mathbf{x}_t | \mathbf{y}_{1:t-1}) = \int p(\mathbf{x}_t | \mathbf{x}_{t-1}) p(\mathbf{x}_{t-1} | \mathbf{y}_{1:t-1}) d\mathbf{x}_{t-1} \quad (4)$$

$$p(\mathbf{x}_t | \mathbf{y}_{1:t}) = \frac{p(\mathbf{y}_t | \mathbf{x}_t) p(\mathbf{x}_t | \mathbf{y}_{1:t-1})}{\int p(\mathbf{y}_t | \mathbf{x}_t) p(\mathbf{x}_t | \mathbf{y}_{1:t-1}) d\mathbf{x}_t} \quad (5)$$

$$p(\mathbf{x}_t | \mathbf{y}_{1:T}) = p(\mathbf{x}_t | \mathbf{y}_{1:t}) \int \frac{p(\mathbf{x}_{t+1} | \mathbf{x}_t) p(\mathbf{x}_{t+1} | \mathbf{y}_{1:T})}{p(\mathbf{x}_{t+1} | \mathbf{y}_{1:t})} d\mathbf{x}_{t+1} \dots (6)$$

時刻0におけるフィルタ分布 $p(\mathbf{x}_0 | \mathbf{y}_0)$ を与えれば、式 (4) と式 (5) を交互に適用することにより、 $p(\mathbf{x}_0 | \mathbf{y}_0) \rightarrow p(\mathbf{x}_1 | \mathbf{y}_1) \rightarrow p(\mathbf{x}_2 | \mathbf{y}_2) \rightarrow p(\mathbf{x}_2 | \mathbf{y}_{1:2}) \rightarrow p(\mathbf{x}_3 | \mathbf{y}_{1:2}) \rightarrow \dots$ と、時間軸に沿って予測分布とフィルタ分布が得られることが分かる (図2)。これが、逐次データ同化にほかならない。この

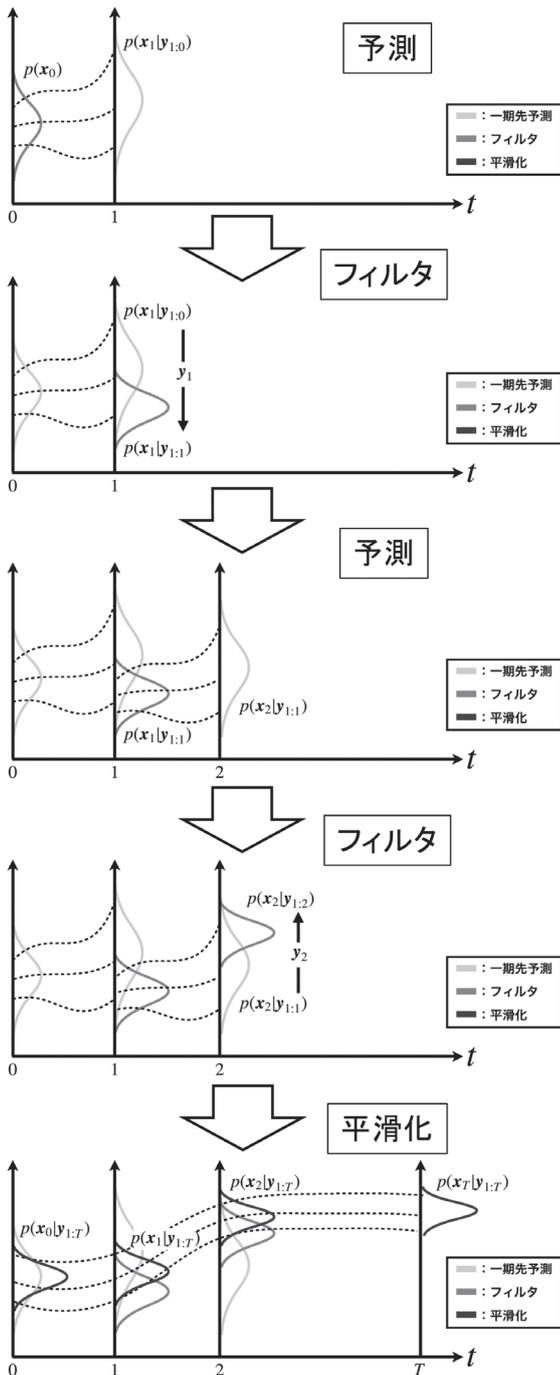


図2 状態の逐次推定概念図

状態の逐次推定を実施した後、式 (6) を用いて、過去における状態の平滑化分布を推定することがある。気象予報のような予測のみ行う場合にはこの平滑化は必要ないが、材料分野においては、なるべく多くのデータを用いた材料特性の高精度推定が必要となる場面も数多くあると思われ、そのような場合には平滑化が有用となってくる。

さて、特殊な条件を満たす場合を除き、式 (4) ~ (6) は解析的に計算することができず、数値積分が必要となる。「特殊な条件」とは、シミュレーションモデル f_t および観測演算子 h_t が行列で与えられ、かつ登場する分布がすべて正規分布であることである。このような場合の逐次推定法は古くからカルマンフィルタ法として知られており、式 (4) ~ (6) は行列とベクトルの演算である線形計算に帰着され、現代のPCであれば、かなり大規模なシミュレーションモデルの場合であっても、非常に高速な逐次推定を実行することが可能である。しかしながら、たいていの実問題はこの条件を満たすことはなく、やはり数値積分を実行せねばならない。

このような場合において、最も簡便かつ素直な方法としては、モンテカルロ法を応用した粒子フィルタ法が有名である。これは乱数を用いることにより、分布を有限の個数の「粒子」と呼ぶ実現値の集合によって近似し、個々の粒子に対するシミュレーションの実行による予測分布の推定、ならびにシミュレーションで得られた粒子とデータとの比較によるフィルタ分布の推定を行うものである。粒子フィルタ法の利点は、何と言っても実装の簡便さであり、シミュレーションコードがブラックボックスであっても適用可能である。しかしながら、高次元の状態ベクトルを必要とするような大規模な問題の場合には、分布を表現するために天文学的な粒子数を要することも珍しくなく、手法の性質上、逐次推定を進めていくうちに粒子数が不足する「退化」と呼ばれる現象が起こりやすい (図3上)。粒子フィルタ法を採用する場合には、シミュレーションモデルの自由度の大きさと必要な粒子数のバランスを、実装前によく検討することが重要である。

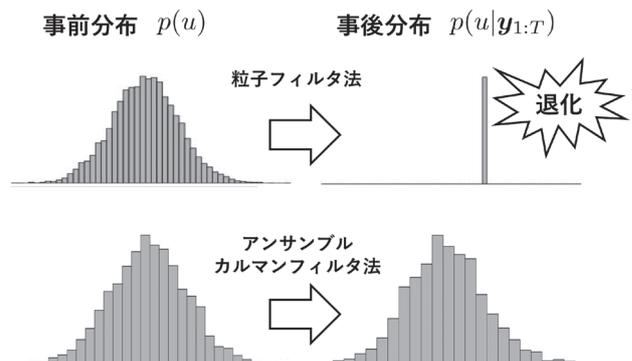


図3 粒子数不足による事後分布の退化

上述したカルマンフィルタ法と粒子フィルタ法の良いところ取りをしたような手法にアンサンブルカルマンフィルタ法がある。粒子フィルタ法同様、分布を粒子によって近似し、個々の粒子に対してシミュレーションを実行することによって予測分布を推定する点は同じであるが、フィルタ分布の推定にはカルマンフィルタ法と類似した手法を採用している。これにより、原理的には粒子フィルタ法のような退化は起こらない(図3下)。アンサンブルカルマンフィルタ法は、逐次データ同化法としては実用性が高く、様々な実問題に応用されている。

本節で述べた逐次データ同化のための3つの手法の特徴について、表1にまとめておく。

2.3 非逐次データ同化における状態推定

非逐次データ同化の代表格である4次元変分法は、現代の気象予報の主力データ同化手法である。4次元変分法を適用する際には、システムノイズ v_t を考慮しない状態空間モデルを用いる。すなわち、システムモデル式(1)は

$$x_t = f_t(x_{t-1}) \dots\dots\dots (7)$$

となり、初期値 x_0 を与えれば、すべての時刻における x_t が決まる自励系である。4次元変分法では、一定期間のデータ $y_{1:T}$ に最も適合する初期値 x_0 を探索することを目的とする(図4)。そのため、まずは x_t と $y_{1:T}$ の適合度を表す評価関数を定義する。上述したように、 x_t は x_0 が与えられればすべて求まることから、適合度を与えるためにはデータ $y_{1:T}$ が与えられた下での x_0 に関する事後分布を考えれば良い。ベイズの定理より、この事後分布は

$$p(x_0 | y_{1:T}) \propto p(x_0) p(y_{1:T} | x_0) \dots\dots\dots (8)$$

で与えられるが、計算の便宜上、評価関数としては事後分布の自然対数を-1倍した

$$J(x_0) = -\log p(x_0) - \sum_{t=1}^T \log q(y_t - h_t(x_t)) \dots\dots\dots (9)$$

がよく用いられ、両者の極値 $x_0 = \hat{x}_0$ は一致することから、式(8)を最大化する代わりに、式(9)の最小化が図られる。

\hat{x}_0 を求めるための直接的な方法として、式(9)を x_0 で偏微分して0とおいた解を求めることがすぐに思いつく。しかしながら、式(9)の右辺第二項は x_0 を陽に含んでいないため、偏微分をすることができない。そこで、ラグランジュ未定乗数法を適用し、式(7)を厳密に満たす下での式(9)の最小化を図ると、変分計算を経て、ラグランジュ未定乗数 λ_t に関する次のアジョイント方程式を得る。

$$\frac{d\lambda_t}{dt} + \left(\frac{\partial f_t}{\partial x_t} \right)' \lambda_t = \frac{\partial J}{\partial x_t} \dots\dots\dots (10)$$

$$\lambda_T = 0 \dots\dots\dots (11)$$

$$\lambda_t = \frac{\partial J}{\partial x_0} \dots\dots\dots (12)$$

ここで、 J は本質的には式(9)の右辺第二項を意味すると考えて差し支えない(厳密には、若干異なる)。時系列の終端点 $t=T$ において式(11)を初期条件とし、式(10)を時間軸に逆方向に解くと、式(12)が示すように、時刻 $t=0$ における解が本来求めなかった評価関数の勾配となっている。このようにして求めた勾配は自動微分と呼ばれ、勾配を評価したい点の近傍における関数値の差分を用いる数値微分と比べ、計

表1 代表的な逐次ベイズフィルタの比較

手法名	状態空間モデル	利点	弱点
カルマンフィルタ	線形・ガウス $\begin{cases} x_t = F_t x_{t-1} + v_t & v_t \sim N(0, Q_t) \\ y_t = H_t x_t + w_t & w_t \sim N(0, R_t) \end{cases}$	<ul style="list-style-type: none"> 計算コスト小 勾配法による最適化が可能 平滑化が可能 	<ul style="list-style-type: none"> 線形・ガウス条件のみ利用可
アンサンブルカルマンフィルタ	非線形/線形・非ガウス $\begin{cases} x_t = f_t(x_{t-1}, v_t) & v_t \sim q(\cdot) \\ y_t = H_t x_t + w_t & w_t \sim N(0, R_t) \end{cases}$	<ul style="list-style-type: none"> 応用範囲が広い 退化が起こらない 	<ul style="list-style-type: none"> 実装の手間大 平滑化は厳しい
粒子フィルタ	非線形・非ガウス $\begin{cases} x_t = f_t(x_{t-1}, v_t) & v_t \sim q(\cdot) \\ y_t = h_t(x_t, w_t) & w_t \sim r(\cdot) \end{cases}$	<ul style="list-style-type: none"> 実装の手間小 常に利用可能 	<ul style="list-style-type: none"> 計算コスト大 退化が頻発 平滑化は絶望的

算量と計算精度の両面において圧倒的に優れている。与えられた初期値 x_0 に対する評価関数の勾配を4次元変分法によって求め、その勾配に準ニュートン法などの適当な勾配法を適用して初期値 x_0 を更新するという手順を繰り返すことにより、最終的にデータ $y_{1:T}$ に最も適合した x_0 ならびに x_t が得られる (図4)。気象予報においては、実際にこのようなデータ同化が絶え間なく行われているのである。

さて、ここまで述べたことは、評価関数を最小化する最適解を得るための方法であり、データ同化の本来の目的である分布を推定するためには、異なるアプローチが必要である。従来の4次元変分法は、上述の最適化のみが行われ、不確実性評価のためにも必須となる分布の推定は行われていなかった。筆者らは近年、2nd-orderアジョイント法を導入することにより、高速かつ高精度な不確実性評価が可能となる新しい4次元変分法を提案した⁸⁾。

3 データ同化の構造材料分野への応用展開

構造材料分野においては、長きにわたって計算と実験はほぼ独立したコミュニティを形成していたが、数年前より材料内における粒成長の数値シミュレーションと、材料に関する大量の実験データを比較していこうという機運が高まり、データ同化をはじめとするデータサイエンスの導入が一気に

進展した。粒成長のシミュレーションに用いられるモデルとしては、雪や岩石内の結晶成長の数理モデルとしても用いられるフェーズフィールドモデルが挙げられ^{11,12)}、次式で与えられる小林モデル¹³⁾は、最も基本的なフェーズフィールドモデルの一つである。

$$\tau \frac{\partial \phi}{\partial t} = \epsilon^2 \Delta \phi + \phi(1-\phi) \left(\phi - \frac{1}{2} + m \right) \quad |m| < \frac{1}{2} \dots\dots\dots (13)$$

ここで、 $\phi(x, t)$ はフェーズフィールド変数であり、固相や液相といった状態を表す。そのため、本来これは0 (固相) と1 (液相) といった離散値を取る変数であるが、時間微分や空間微分を可能とするため、界面近傍においては0と1の間を連続的に変化させる。この変化する区間を界面幅と呼び、 ϵ がそれを表現する。また、 m は界面の移動速度 (モビリティ)、 τ は時間の無次元化パラメータである。式 (13) の右辺第一項と第二項は、それぞれ拡散項および反応項を意味する。

1次元空間の場合には、適当な境界条件の下に式 (13) は解析解を持ち得るが、2次元以上の場合には数値計算が必要となる。図5に、2次元空間内でのシミュレーション結果の例を示す。計算領域は縦200 ϵ × 横300 ϵ 、モビリティは $m = 0.1$ 、空間グリッド幅は ϵ 、時間ステップ幅は0.1 τ とし、計算領域境界においては周期境界条件を課した。フェーズフィールドの初期状態 $\phi(x, t=0)$ が粒成長シミュレーションとしては現実的でない設定となっているが、これは単純なフェーズ

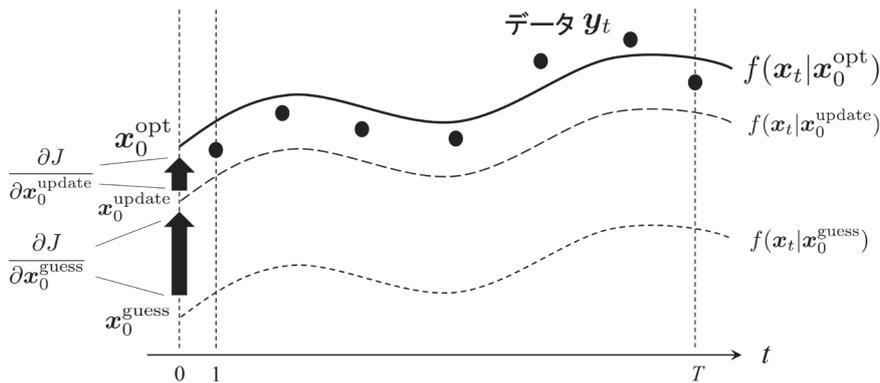


図4 4次元変分法による初期値最適化の模式図

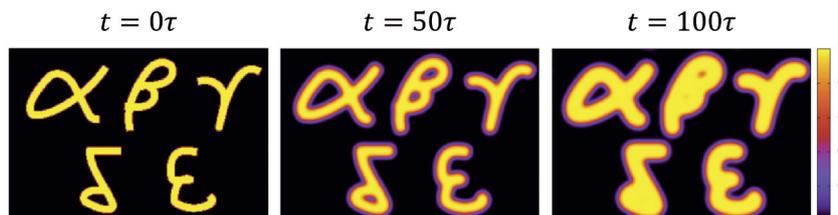


図5 フェーズフィールドモデルに基づくシミュレーション

フィールドモデル (式 (13)) を採用した上で、なるべく複雑な構造を用いようとしたためである。現実的な粒成長を模するためには、フェーズフィールド変数を複数個にしたマルチフェーズフィールドモデル¹⁴⁾を採用する必要がある。簡単のため、以下では小林モデルへの4次元変分法データ同化の適用について述べる。マルチフェーズフィールドモデルへの適用については、筆者らの他の文献⁷⁾を参照してほしい。

さて、実験データが与えられた時に、データ同化によってモビリティ m および初期状態 $\phi(\mathbf{x}, t=0)$ を推定することを考える。実験データは、 $m=0.1$ および図5左に示す初期状態を設定して得られるシミュレーション結果に、正規分布に従う観測ノイズを付加した写真であると仮定する。データ同化がきちんと機能するかどうかは、この写真データから m の値が0.1と推定されること、かつ初期状態が図5左と一致することを確認すれば良い。このように、真の解が分かっているモデルから得られたシミュレーション結果を擬似観測・実験データとし、逆にその擬似データからデータ同化によって真の解が再現されるかどうかを確認するテストを「双子実験」と呼び、データ同化アルゴリズムやコードの妥当性を検証するための手段としてよく用いられる¹⁾。

図6に、4次元変分法に基づく反復計算により、モビリティと初期フェーズフィールドが推定されていく様子を示す。ここでは観測ノイズの標準偏差を 10^{-4} と設定した。また、推定したいパラメータ m を状態ベクトルに含める自己組織化の手法を採用することにより、適当な初期値から反復計算によって m の値が自動的に更新されるようにした。反復回数が

増えるとともに評価関数は単調に減少し、それに伴って m および初期状態 $\phi(\mathbf{x}, t=0)$ が適切に真の解に収斂していく様子が分かる。従来の4次元変分法ではこの最適値の推定までが可能であったが、筆者らが開発した4次元変分法⁸⁾を適用すれば、さらに推定値の不確実性まで評価することが可能である。この不確実性の情報は材料分野では極めて有益であると考えられ、例えば、興味ある材料特性パラメータをある精度で推定したい場合に実施すべき実験回数を提案するなど、実験計画へのフィードバックに利用することができる。

実際に写真データを用いる場合には、それをシミュレーション結果と直接比較することは困難であり、観測演算子 h_t をどのように設計するかが鍵となる。また、実際の材料実験では、時間変化を追跡することを目的に、同一の試料に対して複数回の写真を撮影することは極めて困難であることが多い。このような実情を考慮し、筆者らは時系列データの存在を前提としないデータ同化の適用方法について検討した⁹⁾。ここでは、複数の試料に対して同一条件の実験を実施し、試料によって異なる時刻に得られた写真データから、試料に依存しない特徴量を抽出することを提案している。この特徴量を擬似的な時系列データとみなすことにより、データ同化に基づく材料特性パラメータの推定が可能であることを示した。

4 結語

本稿では、データ同化の基礎理論、ならびに構造材料分野へのデータ同化の応用展開について述べた。3章で述べた4

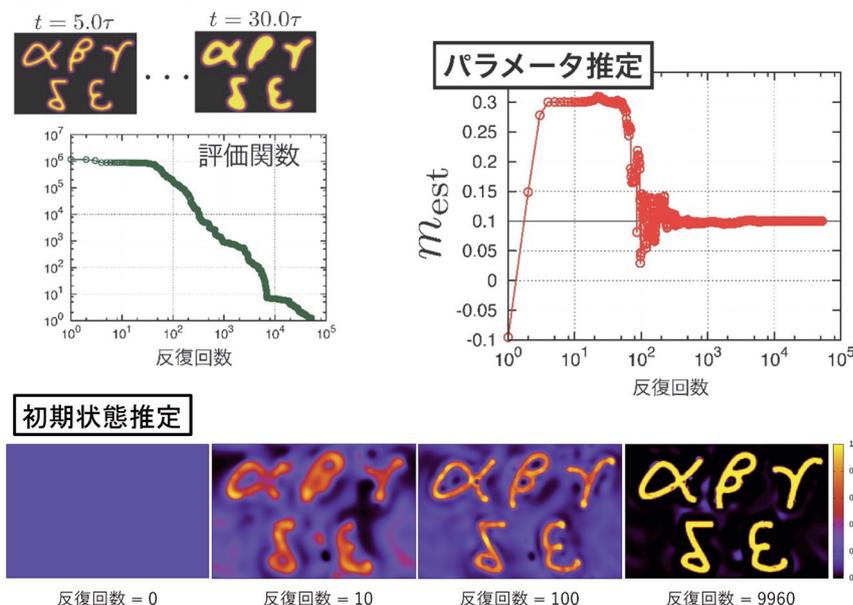


図6 4次元変分法に基づくモビリティとフェーズフィールドの初期状態の推定

次元変分法の応用については、数値シミュレーションコードがブラックボックスではないことを前提としている。数値シミュレーションコードがブラックボックスである場合や、あるいはコードの改修が著しく困難である場合には、逐次データ同化を採用することが現実的である。筆者も共同研究において、等温下でのFe-C-Mn合金内の相変態の問題にアンサンブルカルマンフィルタに基づく双子実験を実施した¹⁰⁾。これは、1次元空間内において γ 相から α 相へ変態する過程において、 γ 相の体積分率の時間変化がデータとして得られる場合に、アンサンブルカルマンフィルタによってモビリティを推定するという数値実験である。その結果、1次元空間の問題であるにも関わらず、モビリティの事後分布を安定的に推定するためには、アンサンブルカルマンフィルタの粒子数を少なくとも1,000のオーダーに設定する必要があるという極めて興味深い結論を得た。これよりも自由度が桁違いに大きい台風進路予測において実施されている逐次データ同化計算では、計算量の兼ね合いから粒子数がせいぜい数十個に抑えられており、満足な予報円を描くことがいかに難しいことであるかが容易に想像がつく。材料科学においては、いずれ現実的な3次元空間内のシミュレーションに対してデータ同化を実装する必要があり、計算量との闘いが待ち構えていることは必至である。限られた計算機資源と計算時間の範囲内で、データ同化が構造材料分野において何をどこまで可能にするか、今後も継続的に検討を重ねていく必要がある。

参考文献

- 1) 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 一次世代のシミュレーション技術一, 朝倉書店, (2011).
- 2) 淡路敏之, 池田元美, 石川洋一, 蒲地政文: 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).
- 3) 露木義, 川畑拓矢: 気象学におけるデータ同化, 気象研究ノート, 日本気象学会, 217 (2008).
- 4) M.Hoshiya and S.Aoki: Bull. Seismol. Soc. Am., 105 (2015) 3, 1324.
- 5) 大林茂, 三坂孝志, 加藤博司, 菊地亮太: データ同化流体科学—流動現象のデジタルツイン—, 共立出版, (2021).
- 6) J. Inoue, M. Okada, H. Nagao, H. Yokota and Y. Adachi: Mater. Trans., 61 (2020) 11, 2058.
- 7) S. Ito, H. Nagao, T. Kasuya and J. Inoue: Sci. Technol. Adv. Mater., 18 (2017) 1, 857.
- 8) S. Ito, H. Nagao, A. Yamanaka, Y. Tsukada, T. Koyama, M. Kano and J. Inoue: Phys. Rev. E, 94 (2016), 043307.
- 9) S. Ito, H. Nagao, T. Kurokawa, T. Kasuya and J. Inoue: Phys. Rev. Materials, 3 (2019) 5, 053404.
- 10) K. Sasaki, A. Yamanaka, S. Ito and H. Nagao: Comput. Mater. Sci., 141 (2018), 141.
- 11) 小山敏幸, 高木知弘: フェーズフィールド法入門, 丸善出版, (2013).
- 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) R. Kobayashi: Phys. D, 63 (1993) 3-4, 410.
- 14) I. Steinbach, F. Pezzolla, B. Nestler, M. Seeßelberg, R. Prieler, G. J. Schmitz and J. L. L. Rezende: Phys. D, 94 (1996) 3, 135.

(2021年4月26日受付)