計算組織学編 増補新版 序文

2011 年に「材料設計計算工学」を，阿部太一氏とともに，それぞれ，計算熱力学編および計算組織学編として出版させていただき，早 8 年が過ぎ，元号も平成から令和へと改元された．連続体モデルに基づく材料設計計算工学のスタンダードとして，CALPHAD 法とフェーズフィールド法は，材料工学の研究開発において，誰もが知る日常的な手法となりつつある．本書はフェーズフィールド法を学ぶ際の学問的基盤を解説したテキストであるので，基本的な部分は不変であり，本増補新版においても，本体の内容については誤記の訂正にとどめた．一方，フェーズフィールド法の適用範囲の拡大・深化はとどまることを知らず，最後の第 8 章の展望が，この 8 年間に大きく展開した．すなわち，マテリアルズ・インフォマティクス（ツールとしては機械学習）の台頭である．実は，フェーズフィールド法の分野と機械学習の分野は，極めて相性がよい．理由は簡単で，機械学習による逆問題をフェーズフィールド法に適用することによって，フェーズフィールド法内で使用される各種のパラメータ値や，場に関する初期値・境界値などを推定できるからである．フェーズフィールド法で，材料組織の時間発展過程を計算するには，多くの物質パラメータ（例えば，ギブスエネルギーの熱力学データ，界面エネルギー，弾性率，格子ミスマッチ，拡散係数，界面移動に関する移動度など）が必要である．しかし，これらのパラメータ全てが，事前に既知であるとは限らない．従来は，実験データを用いる，第一原理計算から得られるデータを用いる，また定番の定数を仮定する，などが行われてきたが，機械学習による逆問題手法を活用すれば，組織形態情報の実験データから，フェーズフィールド法の体系内で，これらのパラメータ値を効率よく推定できる．パラメータの信頼度が上がれば，もちろんフェーズフィールドシミュレーションの精度も向上するので，機械学習がフェーズフィールド法に及ぼす貢献は計り知れない．

そこで本増補新版では，第 8 章に，計算組織学と機械学習の関連性に関する

節を追加するとともに，当該分野の解説を付録に加えた．また機械学習の計算環境では，プログラミング言語として Python が主流となっており，かつこの計算環境にて，簡単な数値計算から，可視化やシミュレーションまで手軽に扱えるため，現在，Python を主要なプログラミング言語としている研究者・技術者が増加している．そこで，フェーズフィールドシミュレーションに関しても，Python を用いたプログラムの説明を，今回，付録に新たに追加した．さらに，金属学の基盤における新分野として，ハイエントロピー合金が，近年，世界的に注目されており，これを受けて，多成分系の拡散に関する理論も新たに付録に加えた．これらの加筆部分は，中長期的に，フェーズフィールド法，ひいては計算組織学のさらなる発展の礎となる内容であり，今回の改訂によって，当該分野の進展がさらに加速することを念願している．最後に，増補新版におけるフェーズフィールドシミュレーションの Python プログラムについては，著者の研究室の学生である松岡佑亮氏にご協力いただいた．感謝申し上げる次第である．

2019 年 10 月

小山 敏幸