

## 金属学会セミナー開催報告(特別講義)

### 拡散解析：基礎から最先端へ

(セミナー・シンポジウム委員会企画)

開催日 2022年10月6日(木)7日(金)

場所 オンライン

今回の金属学会セミナーは、[特別講義]というカテゴリで、オンラインで開催された。前日まで行っていたオンライン教育「状態図・相平衡・拡散の基礎」の応用編という位置付けも考えて今回のテーマを選定させていただいた。特別講義というカテゴリで、基礎的な教育効果に重点をおきつつも、最新の解析理論などを盛り込んだ内容とさせていただいた。講師は、本分野の第一人者である、2名(以下敬称略)：梶原正憲(東工大名誉教授)、小山敏幸(名大)であり、2日間で、8講義(各1~1.5時間で、以下の(1)~(8))を実施した。8つの講義の内容と担当は、以下のようにまとめられる。

(1) 梶原：「拡散律速型の界面移動」 まず、最初に Fick の拡散方程式とその解法から始まり、各種拡散係数と熱力学的な関係について解説され、さらに、異相界面をはさむ拡散対の拡散律速型の界面移動について説明された。

(2) 梶原：「反応拡散の基礎と応用」 二つの相が反応して、中間相が生成する反応拡散の基礎から始まり、界面移動速度の解析的な式などが示された。また、実際の合金における実験結果が例示され、拡散対実験による反応拡散において実験温度や等温保持時間など注意が必要なことが説明された。

(3) 小山：「エネルギー散逸関数と広義のフィックの法則」 フェーズフィールド法の基礎的な説明から始まり、エネルギー散逸関数からその発展方程式が示され、広義のフィックの法則が説明された。

(4) 小山：「CALPHAD 法からフェーズフィールド法へ(拡散現象を対象に)」 計算状態図のギブスエネルギーと拡散理論を結びつけるために、2元系相互拡散理論から始まり、一般化した現象論方程式へと展開し、フェーズフィールド法との関連について解説された。

(5) 小山：「スピノーダル分解理論」 スピノーダル分解の基礎から始まり、歴史的な経緯も含めスピノーダル分解の熱力学と速度論について説明された。また、濃度勾配エネルギー

についての具体的な説明と、界面エネルギーの関係をわかりやすく説明した。実例として不規則相の相分離について、Python プログラムを示すとともに、その実行方法と簡単な結果について解説があった。

(6) 小山：「CALPHAD 法をベースとした拡散理論体系」 CALPHAD 法の熱力学関数の定式化に関する説明から始まり、相互拡散流の式から、元素の易動度、CALPHAD 法による易動度パラメータの記述の方法などを説明し、固有拡散流やトレーサー拡散との関連について解説がなされた。

(7) 小山：「多成分系における拡散対解析」 これまでの説明から2元系における拡散対の相互拡散係数とギブスエネルギー、易動度の関係を示し、それを多元系へ一般化した式が示された。また、拡散対解析手法として名高い Boltzmann-Invary の方法と、さらに簡便な Sauer と Friese の手法などが説明され、拡散プロファイルのフィッティングの方法などがデモンストレーションしながら示された。

(8) 小山：「拡散対シミュレーションと機械学習」 拡散対シミュレーションと機械学習の実習的内容となり、実際のプログラムコードとその実行の手順などの説明がされた。アジョイント法などの逆解析の手法も説明され、機械学習ソールの活用法についても解説された。

[受講者数24名]

拡散理論は、拡散メカニズムを扱う微視的理論から、現象論方程式を取り扱う巨視的理論まであり、非常に広い学問分野である。今回のセミナーでは、主に後者を取り扱った講義であり、応用数学的な要素も強く、理解しにくい部分もあるが、講師が多くの数式を使いながらも、可能な限りエッセンスを伝えようと努めていただいた結果、基礎を押さえつつも、その先の奥深さまで学ぶことができるセミナーになったかと思う。応用的な面でも、教科書などでは見られない、多元系に拡張した一般化された拡散方程式が示されるなど実用的な話題も多くなされた。また、実習的な数値シミュレーションのデモンストレーションも多く取り入れていただき、これから数値シミュレーションに取り組みたい方にも有意義なセミナーになったかと思う。最後に、セミナー開催にあたり、関係各位の多大なるご支援・ご協力に、心より感謝申し上げます。(文責：及川)

(企画世話人代表：東北大 及川勝成，名大 小山敏幸，NIMS 阿部太一)

