強化学習における学習時間削減を目的とした報酬関数推定手法の提案

Proposal of Reward Function Estimation Method for Reducing Learning Time in Reinforcement Learning

内藤 朱里 (Shuri Naito)[1], 岸田 真幸 (Masayuki Kishida)[2]
[1] 岐阜大学 (Gifu University), [2] 岐阜工業高等専門学校 (National Institute of Technoligy, Gifu College)
e-mail : naito.shuri.b3@s.gifu-u.ac.jp

1　はじめに

機械学習の一種である強化学習は，環境との相互作用から得られる報酬を最大化することを目的として試行錯誤によってデータを集める．強化学習において所与とされる報酬は，人間による設計が困難な場合が数多く存在する．不適切な報酬は意図しない行動の獲得や学習時間の増加につながる [1]．この問題に対して提案されたものが逆強化学習である．

本研究では，逆強化学習における目的関数を強化学習におけるステップ数の最小化に変更することによって，強化学習における学習時間を削減する報酬関数推定手法を提案する．提案する目的関数は線形計画法を用いて解くことは困難であることから，既存の逆強化学習アルゴリズムを実数値遺伝的アルゴリズム (RCGA) に置き換える．

2　提案手法

従来法である線形計画法を用いた逆強化学習 [2] は，最適方策を再現することを目的として報酬関数を推定する．本研究の目的である強化学習における学習時間を削減するためには，強化学習において各エピソードあたりのステップ数を減少させるような目的関数を用いることが望ましい．そこで，強化学習におけるステップ数の最小化に向けて線形計画法を用いた逆強化学習の目的関数を式 (1) のように変更する．式 (1) は最終エピソード終了までのステップ数の総和を意味する．

$$\text{minimize} \sum_{n=1}^{N} \kappa_n(\boldsymbol{R}) \tag{1}$$

ここで，κ_n は強化学習における n エピソード目のステップ数，N は最終エピソード数，$\boldsymbol{R}$ は報酬関数を表す．式 (1) に示す項は，加法性を満たさないことから非線形である．よって，線形計画法を用いて解くことが不可能であり，報酬関数は実数で表されることから RCGA を適用する．交叉は BLX-α，選択はトーナメント選択，突然変異は正規分布に基づいたガウス突然変異とする．

3　数値実験

従来法である線形計画法を用いた逆強化学習と提案手法の性能を比較する．各手法の性能は，得られた報酬関数を用いて Q 学習を行い 5000 エピソード終了までの総ステップ数で評価する．Q 学習は 100 回行い，そのステップ数の平均値を比較する．

3.1 問題設定と実験条件

実験環境として Fig. 1 に示す 5 × 5GridWorld のスタートからゴールまでの最短経路を求める問題を用いる．赤矢印は，最短経路を示す．RCGA におけるパラメータについては Table 1 に示す．

なお，性能比較のために行う Q 学習のパラメータはエピソード数 5000，打ち切りステップ数 10000，学習率 $\alpha = 0.1$，割引率 $\gamma = 0.99$ を用いる．

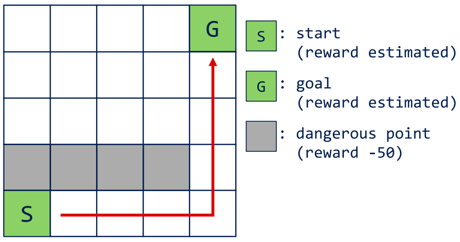


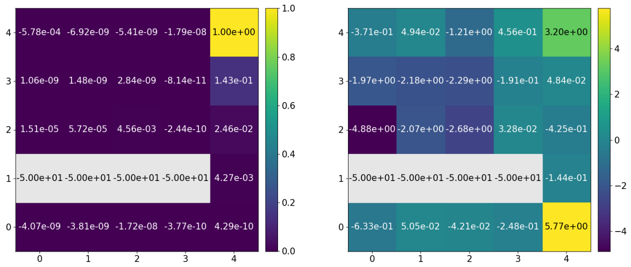
Fig. 1: Experimental environment.

Table 1: Parameters of RCGA.

Parameter	Numeric value
Number of generations	50
Population size	100
Crossover probability	0.5
Mutation probability	0.2

3.3 実験結果の一例

各手法によって得られた報酬関数を Fig. 2，得られた報酬関数を用いて Q 学習を行った結果を Fig. 3 に示す．Q 学習 100 回の計算処理時間は，従来法が 11 h 6 min 25 s，提案手法が 2 min 7 s であった．Fig. 3 より，従来法と比較して提案手法ではステップ数に収束傾向が見られ，最短経路を学習できていると考えられる．また，Fig. 2 において報酬関数の分布を比較すると，提案手法ではゴールに近いほど報酬値が高く，ゴールから遠いかつ危険箇所に近いほど報酬値が低くなっていることがわかる．特に提案手法では $(4, 0)$ のマスで報酬が大きく異なっていることから，提案手法ではサブゴールが設計されていると考えられる．



(a) IRL (b) Proposal method

Fig. 2: Estimated reward function.

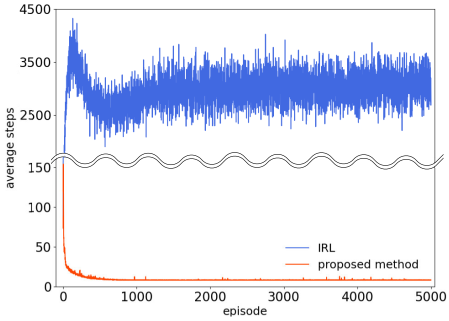


Fig. 3: Convergence curve comparison.

本講演では，より良い報酬関数の導出を目指して側面制約条件を追加した場合の強化学習におけるステップ数への影響についても取り扱う．

4 まとめ

強化学習における学習時間の削減を目的として，逆強化学習における目的関数の変更と最適化アルゴリズムである実数値遺伝的アルゴリズムの導入を提案した．提案手法の適用によって推定された報酬関数を用いることで，強化学習におけるステップ数が減少することを確認した．RCGA の導入により設計されたサブゴールが，強化学習におけるステップ数の減少に影響を与えることが示された．

参考文献

[1] 久保隆宏, 機械学習スタートアップシリーズ Python で学ぶ強化学習 [改訂第 2 版], 講談社, 2019.

[2] Andrew Y. Ng, and Stuart Russell, Algorithms for Inverse Reinforcement Learning, *Proceedings of the 17th ICML*, 2000, pp.663-670.

 Copyright (C) 2025 一般社団法人日本応用数理学会

コンプライアンスのバッファード故障確率による不確実性下でのトラスのデータ駆動型最適設計

Data-driven design optimization under uncertainty of trusses with buffered-failure probability of compliance

藤山 拓巳 (Takumi Fujiyama)[1], 寒野 善博 (Yoshihiro Kanno)[1],
[1] 東京大学 (The University of Tokyo)
e-mail：takumi007@g.ecc.u-tokyo.ac.jp

1　はじめに

従来の信頼性最適設計では，故障確率 (probability of failure, PoF)

$$p_{\mathrm{f}}(\boldsymbol{x}) = \mathbb{P}\{g(\boldsymbol{x};\boldsymbol{f}) > 0\}$$

が信頼性指標として用いられてきた．ここで，$\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^m$ はトラスの部材の断面積を並べた設計変数，$\boldsymbol{f} \in \mathbb{R}^d$ は節点に作用する不確実な荷重を表す確率ベクトル，$g(\boldsymbol{x};\boldsymbol{f})$ は限界状態関数を表し，m はトラスの部材数，d は節点変位の自由度数を表す．PoF は限界状態関数の分位点に対応するため，重大な制約違反を考慮せず，極端な事象に対して安全性が低い設計が選ばれる可能性がある．

バッファード故障確率 (buffered failure probability, BFP) [1] は，分位数の代わりに超分位数を用いて分布の裾を考慮可能にした信頼性指標であり，以下のように定義される [1]：

$$\mathrm{BFP}(\boldsymbol{x}) := \inf\{\alpha \in (0,1) \mid \xi_\alpha(\boldsymbol{x}) \le 0\}. \tag{1}$$

ただし，$\xi_\alpha(\boldsymbol{x})$ は $g(\boldsymbol{x};\boldsymbol{f})$ の α 超分位数を表す．超分位数は $\boldsymbol{f}$ の標本 $\{\hat{\boldsymbol{f}}_1,\dots,\hat{\boldsymbol{f}}_n\}$ を用いて，

$$\xi_{\alpha_0} \simeq \min_{y\in\mathbb{R}} \left\{ y + \frac{1}{1-\alpha_0}\sum_{i=1}^{n} p_i [g(\boldsymbol{x};\hat{\boldsymbol{f}}_i) - y]^+ \right\} \tag{2}$$

と近似される．ただし，$[a]^+ := \max\{a,0\}$ であり，$\boldsymbol{p} \in \mathbb{R}^n_{++}$ は各標本に対する重みを表す．

本研究では，トラスのコンプライアンスに対する BFP 制約付き体積最小化問題を考える．標本の重みの不確実性を考慮した最適化問題を定式化し，それを 2 次錐計画問題に帰着させる．さらに，違反制約のみを逐次追加するワーキングセット (working set, WS) 法を導入し，効率的な求解を図る．最後に，数値実験を通じて提案手法の有効性を確認する．

2　最悪 BFP 制約付き体積最小化問題の定式化と 2 次錐計画問題への帰着

目的関数を部材の総体積 $\boldsymbol{l}^\top\boldsymbol{x}$ とし，限界状態関数はコンプライアンス

$$\pi(\boldsymbol{x};\boldsymbol{f}) = \sup_{\boldsymbol{u}\in\mathbb{R}^d} \{2\boldsymbol{f}^\top\boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}^\top K(\boldsymbol{x})\boldsymbol{u}\}$$

を用いて

$$g(\boldsymbol{x};\boldsymbol{f}) = \pi(\boldsymbol{x};\boldsymbol{f}) - \bar{\pi}$$

と定める．ここで，$\boldsymbol{l} \in \mathbb{R}^m_{++}$ はトラスの部材の長さを並べたベクトル，$\boldsymbol{u} \in \mathbb{R}^d$ は節点変位を表すベクトル，$\bar{\pi}$ はコンプライアンスの上限に対する制約値を表し，$K(\boldsymbol{x}) \in \mathcal{S}^d_+$ は剛性行列を表す．ただし，$\mathcal{S}^d_+$ は d 次の半正定値実対称行列の集合を表す．

超分位数の近似 (2) では通常，等重み ($\boldsymbol{p} = n^{-1}\mathbf{1}$) が仮定されるが，実際の重みには不確実性が存在する．このため，本研究では重み $\boldsymbol{p}$ の不確実性集合 $\mathcal{P}_\beta$ を以下のように定義する：

$$\mathcal{P}_\beta = \left\{ \boldsymbol{p} \in \mathbb{R}^n \middle| \boldsymbol{p} = \frac{1}{n}\mathbf{1} + \boldsymbol{e},\ \mathbf{1}^\top \boldsymbol{e} = 0,\ \|\boldsymbol{e}\| \le \beta \right\}. \tag{3}$$

ここで，β は不確実性の大きさを表すパラメータであり，$0 < \beta < n^{-1}$ を満たすとする．$\boldsymbol{f}$ の標本 $\{\hat{\boldsymbol{f}}_1, \dots, \hat{\boldsymbol{f}}_n\}$ が与えられたとき，コンプライアンスに対する BFP の最悪値制約付き体積最小化問題を，重みの不確実性集合 (3) と補助的な変数 $\boldsymbol{z} \in \mathbb{R}^n$ を用いて

$$\begin{aligned} \underset{\boldsymbol{x} \in X, y, \boldsymbol{z} \in \mathbb{R}^n_+}{\mathrm{Min.}} \quad & \boldsymbol{l}^\top \boldsymbol{x} \\ \mathrm{s.t.} \quad & y + \frac{1}{p_{\mathrm{bfp}} n} \max_{\boldsymbol{p} \in \mathcal{P}_\beta} \{\boldsymbol{p}^\top \boldsymbol{z}\} \le \bar{\pi}, \\ & \pi(\boldsymbol{x}; \hat{\boldsymbol{f}}_i) - y \le z_i, \quad i = 1, \dots, n \end{aligned} \tag{4}$$

と定式化する．ここで，X は $\boldsymbol{x}$ の実行可能領域であり，p_{bfp} は BFP の上限に対する制約値を表す．問題 (4) の内部の最大化問題は行列 $\mathit{\Pi} = I_n - n^{-1}\mathbf{1}\mathbf{1}^\top$ を用いることで，2 次錐計画問題へと帰着できる．さらに，コンプライアンスに対する不等式制約は 2 次錐制約で表現可能であるから [2]，問題 (4) 自体も 2 次錐計画問題に帰着できる．

3 ワーキングセット法による効率的な求解

問題 (4) では，分布の裾に位置する標本のみが最終的な制約に関与する．本研究では，制約違反のみを逐次的に追加していく WS 法を導入する．

まず，荷重標本の平均ベクトル $\bar{\boldsymbol{f}} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \hat{\boldsymbol{f}}_i$ に対して，コンプライアンス制約付き体積最小化問題を解き，初期解 $\boldsymbol{x}^{(0)}$ を得る．以降の反復で最適化問題に含まれる制約の添字集合を $W^{(k)}$ とする．次に，各標本の制約違反量 $z_i^{(k)} = \pi(\boldsymbol{x}^{(k)}; \hat{\boldsymbol{f}}_i) - \bar{\pi}$, $i = 1, \dots, n$ を求める．そして，違反量が $z_i^{(k)} > 0$ を満たす制約の添字集合を $V^{(k)}$ とし，違反量が上位の制約に対応する $V^{(k)}$ の部分集合を $C^{(k)}$ とする．最後に，$W^{(k+1)} \leftarrow W^{(k)} \cup C^{(k)}$ と更新した問題を解いて最適解 $\boldsymbol{x}^{(k+1)}$ を得る．この手順を違反制約がなくなる（つまり，$V^{(k)} = \emptyset$ となる）まで繰り返す．

4 数値実験

数値実験では, 部材数 $m = 289$ の平面トラスの問題設定を扱う．全ての制約を用いた場合と WS 法を用いた場合の計算時間や収束履歴の比較を行う．

5 おわりに

本研究では，トラスのコンプライアンスに対する BFP 最悪値制約付き体積最小化問題を定式化し，2 次錐計画問題へと帰着した．そして，WS 法を導入し，数値実験を行った．今後の課題として, 不確実性の大きさを表すパラメータ β の値の設定法の確立が挙げられる．

参考文献

[1] R. T. Rockafellar and J. O. Royset. On buffered failure probability in design and optimization of structures. *Reliability Engineering System Safety*, Vol, 95(2010), 499–510.

[2] A. Ben-Tal and A. Nemirovski. *Lectures on Modern Convex Optimization.* SIAM, Philadelphia (2001).

コンクリート構造物の非定常熱伝導解析における解析条件の検討

Investigation of analytical conditions for unsteady heat transfer analysis of concrete structures

蔭山 志穂 (Kageyama Shiho)[1], 勢登 遥 (Seto Haruka)[1], 田中 菜月 (Tanaka Natsuki)[1]
山下 民岐子 (Yamashita Mikiko)[2], 川西 弘一 (Kawanishi Koichi)[2]
竹内 謙善 (Takeuchi Kenzen)[1]
[1] 香川大学 (Kagawa University), [2] 西日本高速道路エンジニアリング四国株式会社 (West Nippon Expressway Engineering Shikoku Co.Ltd.)
e-mail : ss22t011@kagawa-u.ac.jp

1　はじめに

高速道路のメンテナンスにおいて、コンクリート表面の温度分布から内部欠陥箇所を推定する手法があるが、欠陥形状までは特定できないことが課題となっている。この課題に対して本研究では、気温の日較差によってコンクリート構造物の表面が加熱、冷却された結果として生じる表面の温度分布からコンクリート内部の欠陥形状を同定している。コンクリートと欠陥部分の空気の物性値を表すパラメータを設計変数として、随伴変数法を用いて感度を計算し、設計変数を更新する。倉橋ら [1] は鉄筋の腐食形状推定に随伴変数法を利用している。片峯ら [2] は部分境界における温度分布を規定する形状最適化問題に対して随伴変数法を適用している。これまでに内部の浅い位置に存在する単純な欠陥形状を同定できることが分かっている。[3] しかしながら、これを実用化するためには短時間での解析が求められており、本研究ではそのための解析条件を検討した。

2　温度分布に基づく欠陥形状同定問題

領域 $\Omega \in \mathbb{R}^3$、時間 $[0, T]$ における非定常熱伝導を考える。領域内の座標を $x \in \Omega$、時間を $t \in [0, T]$ とする。領域 Ω の境界 Γ は、断熱境界 Γ_0、熱伝達境界 Γ_h から構成されている。熱伝達境界 Γ_h における熱伝達率を h、雰囲気温度を $\bar{\phi}(t)$ とする。領域 Γ_h における熱伝導率を $k(x)$、比熱と密度の積を $C_\rho(x)$ とする。これらの値は健全部分ではコンクリートの物性値と一致し、欠陥部分では空気の物性値となる。

領域 Ω における温度を $\phi(\boldsymbol{x}, t)$ として、非定常熱伝導方程式と境界条件は以下のように記述する。

$$k\Delta\phi = C_\rho \frac{\partial \phi}{\partial t} \qquad \text{in}\,\Omega \tag{1}$$

$$k\nabla\phi \cdot \boldsymbol{n} = 0 \qquad \text{on}\,\Gamma_0 \tag{2}$$

$$k\nabla\phi \cdot \boldsymbol{n} = h(\overline{\phi} - \phi) \qquad \text{on}\,\Gamma_\mathrm{h} \tag{3}$$

密度 $m(x) \in [0, 1]$ を導入する。$k(x)$、 $C_\rho(x)$ は $m(x)$ の値によって決定する。さらに、設計変数 $\theta(x) \in \mathbb{R}$ を導入する。設計変数 θ と密度 m はシグモイド関数を介して関連付ける。

$$m = \frac{\tanh(2\theta(x)) + 1}{2} \tag{4}$$

整理すると、物性値 k, C_ρ は以下のように決定される。

$$k = k(m(\theta(x))) \qquad C_\rho = C_\rho(m(\theta(x)))$$

テスト関数を $w(\boldsymbol{x}, t)$ として、非定常熱伝導方程式と境界条件は次式のような弱形式に書き換えられる。

$$
\begin{aligned}
&\int_0^T\int_\Omega k\nabla\phi\cdot\nabla w\,d\Omega\,dt+\int_0^T\int_\Omega C_\rho\frac{\partial\phi}{\partial t}w\,d\Omega\,dt\\
&+\int_0^T\int_{\Gamma_h} h\phi w\,d\Gamma\,dt-\int_0^T\int_{\Gamma_h} h\overline{\phi}w\,d\Gamma\,dt=0\,,\ \forall w
\end{aligned}
\tag{5}
$$

この弱形式に基づいて、有限要素法による離散化が行われる。

時間 $t\in[T_1,T_2], 0\le T_1\le T_2\le T$ において、熱伝達境界 Γ_h において所望の温度分布を $\hat{\phi}$ とする。そして、目的関数 J を次式のように定義する。

$$
J(\phi)\equiv\int_{T_1}^{T_2}\int_{\Gamma_h}(\phi(t)-\hat{\phi})^2\,d\Gamma\,dt \tag{6}
$$

ラグランジュ乗数法を適用すると、目的関数 J の設計変数 θ に対する微分は次式のように計算できる。

$$
J_\theta(\theta)=L_\theta(\theta)=\int_0^T\int_\Omega\dot{\theta}\left(\frac{\partial k}{\partial m}\frac{\partial m}{\partial\theta}\nabla\phi\cdot\nabla w+\frac{\partial C_\rho}{\partial m}\frac{\partial m}{\partial\theta}\frac{\partial\phi}{\partial t}w\right)d\Omega\,dt \tag{7}
$$

ここで、次式で定義される $G(x)$ を感度と呼ぶこととする。随伴変数法により感度を計算することで勾配法による設計変数の更新が可能である。

$$
G(x)\equiv\int_0^T\left(\frac{\partial k}{\partial m}\frac{\partial m}{\partial\theta}\nabla\phi\cdot\nabla w+\frac{\partial C_\rho}{\partial m}\frac{\partial m}{\partial\theta}\frac{\partial\phi}{\partial t}w\right)dt \tag{8}
$$

3　解析時間短縮のための解析条件の検討

解析時間を短縮するために計算機の変更、コンクリートモデルの節点数の削減、解析ステップ数の削減を行った。コンクリートモデルの節点数削減について、モデルサイズとメッシュサイズを検討した結果、モデルサイズは精度を保証するために 300mm×300mm×300mm のモデルを採用した。メッシュサイズは表面から 50mm までを 5mm 間隔、以降奥に進むにしたがって段階的に粗くした。解析ステップ数の削減について、これまでの 30 ステップから 6 ステップに変更した。全ての条件を踏まえ、最終的に解析時間を約 18 時間から約 25 分に短縮させることができた。

参考文献

[1] 倉橋貴彦，大下英吉: コンクリート表面における実計測温度を用いた鉄筋の部分腐食形状推定問題, 日本応用数理学会論文誌, Vol.21, No. 3, pp.221-240, 2011.

[2] 片峯英次，畔上秀幸，松浦易広: 非定常熱伝導場における形状同定問題の解法，日本機械学会論文集，Vol.66, pp.227-234, 2000.

[3] 勢登遥, 蔭山志穂, 山下民岐子, 川西弘一, 竹内謙善, 温度分布に基づくコンクリート構造物の欠陥形状同定手法, 計算工学会講演論文集, Vol.30, G-08-02, 2025

粒子成長の再現シミュレーションを目的とした フェーズフィールド解析における化学的駆動力の同定解析

Identification of chemical driving forces in phase-field analysis for particle growth processes simulation

倉橋 貴彦 (Takahiko Kurahashi)[1], 岩元 康晃 (Yasuaki Iwamoto)[2],
上林 恵太 (Keita Kambayashi)[1], 溝尻 瑞枝 (Mizue Mizoshiri)[1]
[1] 長岡技術科学大学 機械系 (Nagaoka University of Technology),
[2] 長岡技術科学大学 工学部 工学課程 機械工学分野 (Nagaoka University of Technology)
e-mail: kurahashi@mech.nagaokaut.ac.jp

1 はじめに

本研究では，粒子の成長過程を再現する数値解析モデルの構築を目的とする．ナノ粒子の合成実験においては，実験条件によりサイズの異なる粒子が合成されることが報告されており[1]，実験条件と合成される粒子サイズとの関係を明らかにできれば，実験に要する時間の大幅な短縮にも繋がる．粒子の成長過程を再現する数値解析法としてはフェーズフィールド法[2]を導入し，支配方程式として，フェーズフィールド変数の時間発展方程式を導入する．また，本研究においては，粒子の成長が停止する過程は化学的駆動力の時間変化により表すことにし，化学的駆動力の時間変化の同定に対して，直接微分法[3]を適用する．

2 化学的駆動力の同定に関する定式化および検討結果について

複数の粒子の成長過程の再現を想定し，マルチフェーズフィールド解析におけるフェーズフィールド変数の時間発展方程式を用いる（式(1)：変数の詳細は[2]を参照．）．本検討では，解析対象領域，対象時間内において，実験結果とシミュレーションの結果においてフェーズフィールド変数が一致するように化学的駆動力を同定する問題を考えるため，式(2)に示す評価関数を定義する．ϕ_1はフェーズフィールド変数，ϕ_{1_obs}は実験による測定値，t_0およびt_fは解析の開始および終端時刻，Ωは解析対象領域を示す．式中におけるAは被積分関数を示す．ここで直接微分法に基づき感度方程式を誘導すると式(3)のように書くことができる．一般にフェーズフィールド変数ϕ_1は 0 から 1 の間で与えられ，$\phi_1 = 0$の場合，式(3)において分母が$\sqrt{\phi_i \phi_j}$と表されている項は計算ができないことになる．そこで，当該項に対してはロピタルの定理を適用し，計算を実施する．この対応の元，$\frac{\partial \phi_i}{\partial \Delta F_{12}}$を算定した後，式(4)に示すように$\frac{\partial A}{\partial \Delta F_{12}}$（式(4)左）を計算し，$\Delta f_{12}$（式(4)右）を更新することになる．ここに$l$は反復回数を示す．

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial t} = -\frac{2}{n}\sum_{j=1}^{n} M_{ij}^{\phi}\left[\sum_{k=1}^{n}\left\{\left(W_{ik}-W_{jk}\right)\phi_k + \frac{1}{2}\left(a_{ik}^2 - a_{jk}^2\right)\nabla^2\phi_k\right\} - \frac{8}{\pi}\sqrt{\phi_i\phi_j}\Delta F_{ij}\right] \tag{1}$$

$$J = \frac{1}{2}\int_{t_0}^{t_f}\int_{\Omega}\left(\phi_1 - \phi_{1_obs}\right)^2 d\Omega\, dt = \int_{t_0}^{t_f} A dt \tag{2}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\frac{\partial \phi_i}{\partial \Delta F_{12}} = -\frac{2}{n}\sum_{j=1}^{n} M_{ij}^{\phi}\left[\sum_{k=1}^{n}\left\{\left(W_{ik}-W_{jk}\right)\frac{\partial \phi_i}{\partial \Delta F_{12}}+\frac{1}{2}\left(a_{ik}^2-a_{jk}^2\right)\nabla^2\frac{\partial \phi_i}{\partial \Delta F_{12}}\right\}-\frac{8}{\pi}\times\frac{1}{2}\frac{\phi_i\frac{\partial \phi_j}{\partial \Delta F_{12}}}{\sqrt{\phi_i\phi_j}}\Delta F_{ij}-\right.$$

$$\left.-\frac{8}{\pi}\times\frac{1}{2}\frac{\phi_j\frac{\partial \phi_i}{\partial \Delta F_{12}}}{\sqrt{\phi_i\phi_j}}\Delta F_{ij}-\frac{8}{\pi}\sqrt{\phi_i\phi_j}\right] \quad (3)$$

$$\frac{\partial A}{\partial \Delta F_{12}} = \int_{\Omega}\left(\phi_1-\phi_{1_obs}\right)\frac{\partial \phi_1}{\partial \Delta F_{12}}d\Omega \qquad \Delta f_{12}{}^{l+1} = \Delta f_{12}{}^{l} - \alpha\frac{\partial A}{\partial \Delta F_{12}}{}^{l} \quad (4)$$

検討結果の概要を図 1 に示す．（解析例の詳細は，講演時に紹介．）図 1 の左は評価関数の収束履歴（青点：評価関数，赤点：右軸の収束判定式の値），右は化学的駆動力（青点：正解，橙点：評価関数収束時のΔf_{12}）の時間履歴を示す．今回の数値実験では，実際の実験結果で無く，図 1 の右の青点のΔf_{12}を与えた際のϕ_1の分布を，擬似的な測定値とし，Δf_{12}の時間変化に関する同定可能性について検証を行った．結果として，評価関数は単調に減少し，収束することを確認できた．また，図 1（右）に示すように，評価関数収束時のΔf_{12}（橙点）は 50 秒以降，正解とする青点と同様に減少する傾向を捉えることができた．

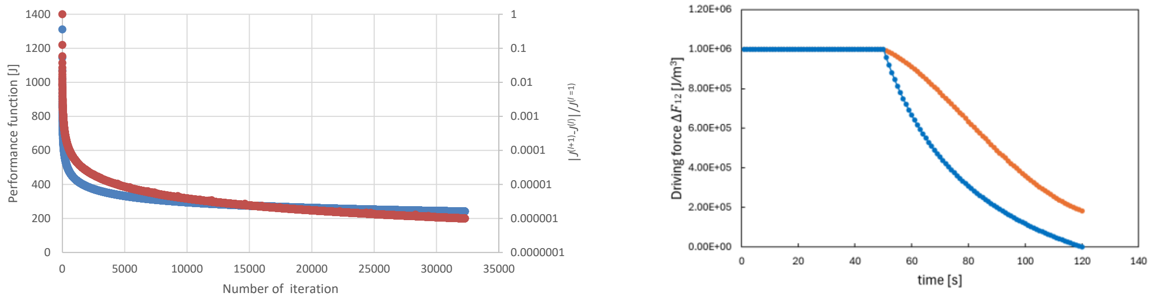


図 1　解析結果（左：評価関数の収束履歴，右：化学的駆動力Δf_{12}の時間履歴）

本研究では，フェーズフィールド法を用いて粒子成長に関するシミュレーションを行い，粒子成長が途中で停止するメカニズムを化学的駆動力の時間変化により表現する方法について検討を行った．化学的駆動力の同定手法としては直接微分法を採用し，最急降下法に基づき収束計算を行った．また，感度方程式の一部の項にロピタルの定理を適用することにより，同定解析を可能とし，数値実験による検討を通じて，定式化の妥当性を示すことができた．本研究の導入にあたり，マイクロ・ナノプロセス応用研究室（溝尻研）の協力により，ナノ粒子の合成実験を見学させていただく機会を得た．ここに深く感謝の意を表する．

参考文献

[1] K.V.T. Nguyen et al., Effect of Cu_2O nanosphere size on femtosecond laser reductive sintering/melting for Cu printing, Nano-Structures and Nano-Objects, 36(2023), 101062.

[2] 高木知弘，山中晃徳，フェーズフィールド法，養賢堂, 2012.

[3] 畔上秀幸，形状最適化問題，森北出版, 2016.