

マルチフェーズフィールド法と マルコフ連鎖モンテカルロ法を用いた 鉄鋼材料の $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態の数値シミュレーション

Numerical simulation of austenite-to-ferrite transformation of steel
using multi-phase-field method and Markov chain Monte Carlo method

鈴木大稀¹⁾, 山中晃徳²⁾

Taiki Suzuki and Akinori Yamanaka

1) 東京農工大学大学院 工学府 (〒184-8588 東京都小金井市中町2-24-16, E-mail: s248018r@st.go.tuat.ac.jp)

2) 博士 (工学) 東京農工大学大学院 工学研究院 教授 (〒184-8588 東京都小金井市中町2-24-16,
E-mail: a-yamana@cc.tuat.ac.jp)

To improve the balance between strength and ductility of steels, it is essential to predict and control the microstructure evolution during the austenite-to-ferrite transformation. The non-equilibrium multi-phase field (NEMPF) model enables to simulate the microstructure evolution during the austenite-to-ferrite transformation, along with the diffusion of solute atoms. However, parameters and physical properties included in the NEMPF model -particularly, the permeability parameter of solute atoms- have to be identified for more accurate prediction. In this study, we conduct the numerical experiment to estimate the permeability parameter of solute atoms in the NEMPF model from C and Mn concentration profiles, based on Markov chain Monte Carlo (MCMC) method. The result of numerical experiment demonstrates that the MCMC method can successfully estimate the true value of the permeability and evaluate the uncertainty of the estimated permeability and the synthetic experimental data.

Key Words : Steel, Austenite-to-ferrite transformation, Phase-field method, Bayesian inference, Markov chain Monte Carlo method

1. 緒言

優れた強度と延性を兼備する鉄鋼材料の開発には、オーステナイト(γ) → フェライト(α)変態におけるミクロ組織形成過程の理解と制御が不可欠である。特に、 $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態は異相間の溶質元素の濃度分配に律速されるため、濃度分配を含めた組織形成過程の解明が求められる^[1]。

山下ら^{[2][3]}は、電解放出型電子線マイクロアナライザ(Field Emission - Electron Probe Micro Analyzer; FE-EPMA)を用いて、Fe-C-Mn-Si合金の等温 $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態における溶質濃度の分配挙動を実験的に測定し、CやMnの化学組成の変化が変態速度に大きく影響することを示した。しかしながら、実験データの蓄積のみによる変態機構の解明およびミクロ組織形成過程の予測は困難である。そこで、数値シミュレーションによるミクロ組織形成過程の予測が行われている。

マルチフェーズフィールド (Multi-Phase-Field; MPF) 法^[4]は、材料の全自由エネルギーに基づきミクロ組織形成過程を解析できるため、 $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態挙動の解析に広く用いられてきた^{[5][6][7]}。本研究では、合金組成や温度条件に応じた様々な律速モードの下で $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態挙動を解析するために、非平衡マルチフェーズフィールド (Non-Equilibrium Multi-Phase-Field; NEMPF) モデル^{[8][9][10]}を用いる。NEMPFモデルでは、界面パーミアビリティと呼ば

れる、 α/γ 界面における濃度分配量を規定するパラメータを導入することで、異相間の濃度分配を表現する。そのため、濃度分配を含めた組織形成過程の高精度な予測には、NEMPFモデルに含まれる界面パーミアビリティの適切な設定が不可欠である。界面パーミアビリティは、合金の熱力学データと関連付けることができるとされているが^[8]、未だ定式化されていないため、実験データを活用した逆推定が求められる。

NEMPFモデルに含まれるパラメータの推定手法として、マルコフ連鎖モンテカルロ (Markov Chain Monte Carlo; MCMC) 法^[11]がある。MCMC法では、パラメータを確率分布として扱うため、不確実性を考慮した推定が可能である。Noii et al.^[12]は、アルミニウム合金の単軸引張試験結果をもとに、MCMC法を用いてフェーズフィールド破壊モデル^[13]に含まれる材料パラメータを推定した。この手法を用いてNEMPFモデルに含まれる界面パーミアビリティを推定することで、より高精度な変態挙動の予測が可能になると考える。

本研究では、 $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態挙動を高精度に予測するため、MCMC法を用いて、NEMPFモデルに含まれる界面パーミアビリティを推定することを目的とする。本稿では、Fe-C-Mn合金における等温 $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態の1次元MPFシミュレーションを対象とし、FE-EPMA等で取得可能な溶質濃

度分布から、NEMPFモデルに含まれる界面パーミアビリティを推定する数値実験を行った結果を示す。

2. 非平衡マルチフェーズフィールドモデル

本研究で使用するNEMPFモデルを説明する。結晶粒数 N 、溶質元素数 $n-1$ の系において、NEMPFモデルで $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態挙動を表現するには、結晶粒 i ($i = 1, 2, \dots, N$) の存在確率を表すフェーズフィールド (Phase-Field; PF) 変数 ϕ_i と溶質元素 k ($k = 1, 2, \dots, n-1$) の濃度変数 c^k を定義する。

次に、 ϕ_i, c^k の関数として、解析対象に応じた系の全自由エネルギーを定義する。本研究では、CALPHAD^[13]データより計算する化学的自由エネルギー密度 g_{chem} 、ダブルオブスタクルボテンシャル g_{doub} 、勾配エネルギー密度 g_{grad} を考慮し、次式の全自由エネルギー汎関数を構築する。

$$G = \int_V \{g_{\text{chem}}(\phi, c) + g_{\text{doub}}(\phi) + g_{\text{grad}}(\nabla \phi)\} dV \quad (1)$$

式(1)で示した自由エネルギー汎関数が単調減少するようにミクロ組織変化が生じると仮定すると、Allen-Cahn方程式より、PF変数 ϕ_i の時間発展方程式は次式で表される。

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial t} = -\frac{2}{N} \sum_{\substack{j=1 \\ (j \neq i)}}^N M_{ij}^{\phi} \left(\frac{\delta G}{\delta \phi_j} - \frac{\delta G}{\delta \phi_i} \right) \quad (2)$$

ここで、 M_{ij}^{ϕ} は結晶粒 i, j ($j = 1, 2, \dots, N$) 間のフェーズフィールドモビリティである。また、バルク領域の濃度変数 c^k の時間発展方程式は、Chan-Hilliard方程式より次式で表される。

$$\frac{\partial c^k}{\partial t} = \nabla \cdot \left\{ \sum_{i=1}^N \phi_i \sum_{j=1}^{n-1} D_{kj}^i \nabla c_k^i \right\} \quad (3)$$

ここで、 D_{kj}^i は、 k, j 元素間における、 i 相における k 元素の拡散係数、 c_k^i は i 相における k 元素の濃度を表す局所濃度変数である。また、局所濃度変数 c_k^i の時間発展方程式は、Allen-Cahn方程式より次式で表される。

$$\frac{\partial c_k^i}{\partial t} = -\sum_{j=1}^{n-1} P^k \frac{\delta G}{\delta c_j^i} \quad (4)$$

ここで、 P^k は溶質元素 k の界面パーミアビリティと呼ばれ、界面での溶質元素濃度の分配量を規定するパラメータである。本研究では、Fe-C-Mn合金を対象とするため、C および Mn の界面パーミアビリティを推定対象とする。

3. マルコフ連鎖モンテカルロ法

本研究では、NEMPFモデルに含まれる界面パーミアビリティの推定手法として、MCMC法の一般的なアルゴリズムであるメトロポリス・ヘイステイングス (Metropolis-Hastings; MH) 法^{[14][15]}を用いる。推定対象とするパラメータにより構成されるベクトルを θ とすると、実験データ D (本稿では C および Mn 濃度分布とする) が与えられた場合、パラメータの事後分布 $\pi(\theta|D)$ は、ベイズの定理^[16]より次式で表される。

$$\pi(\theta|D) \propto L(D|\theta) p(\theta) \quad (5)$$

ここで、 $L(D|\theta)$ は実験データと NEMPF シミュレーション結果の近しさを表す尤度関数、 $p(\theta)$ は事前分布である。MH

法では、次式に示す詳細釣り合い条件^[17]を満たすマルコフ連鎖を設計することで、パラメータの事後分布 $\pi(\theta|D)$ を近似的に求めることができる。

$$\pi(\theta|D)P(\theta \rightarrow \theta') = \pi(\theta'|D)P(\theta' \rightarrow \theta) \quad (6)$$

ここで、 $P(\theta \rightarrow \theta')$ は、パラメータが θ から θ' に遷移する確率である。この詳細釣り合い条件を満たすように遷移確率 $P(\theta \rightarrow \theta')$ を構築することで、マルコフ連鎖がパラメータの事後分布 $\pi(\theta|D)$ に収束することが保証される^[12]。

Figure 1に、MH法のアルゴリズムのフローチャートを示す。MH法では、推定対象となるパラメータの事前分布 $p(\theta)$ より提案分布 $q(\theta)$ を設定し、 $t = 0$ ステップにおける初期値 $\theta^{(0)}$ を決めた後、以下のアルゴリズムで推定対象のサンプル $\theta^{(1)}, \theta^{(2)}, \dots, \theta^{(t)}, \dots$ を取得する。

- (1) 提案分布 $q(\theta)$ に従う乱数 ε を生成し、 $\theta^{\text{cand}} = \theta^{(t-1)} + \varepsilon$ を $\theta^{(t)}$ のパラメータの候補値として提案する。本稿では、提案分布として平均値 0 の正規分布を用いる。
- (2) 提案された候補値を用いて NEMPF シミュレーションを実施する。C, Mn 濃度分布を用いて、ベイズの定理に基づき、事後分布 $\pi(\theta|D)$ を計算する。
- (3) 次式に示す、提案値の受諾率 α を計算する。

$$\alpha = \frac{\pi(\theta^{\text{cand}}|D)q(\theta^{\text{cand}}|\theta^{(t-1)})}{\pi(\theta^{(t-1)}|D)q(\theta^{(t-1)}|\theta^{\text{cand}})} \quad (7)$$

この提案値の受諾率は、式(6)に示す詳細釣り合い条件から導出できる^[12]。

- (4) 確率 α で候補値を受諾する。すなわち、0 以上 1 以下の様な乱数 r を生成し、 $r \geq \alpha$ であれば提案を受諾して $\theta^{(t)} = \theta^{\text{cand}}$ とする。 $\alpha < r$ であれば提案を棄却して $\theta^{(t)} = \theta^{(t-1)}$ とする。

(1) ~ (4) を十分に繰り返した後、推定値から初期値の影響を取り除くために、初期値の影響を受けているサンプルを取り除く操作を行う。ここで取り除くサンプルをバーン・イン (burn-in) 期間^[17]と呼ぶ。その後、残ったサンプルを使用してパラメータの推定を行う。

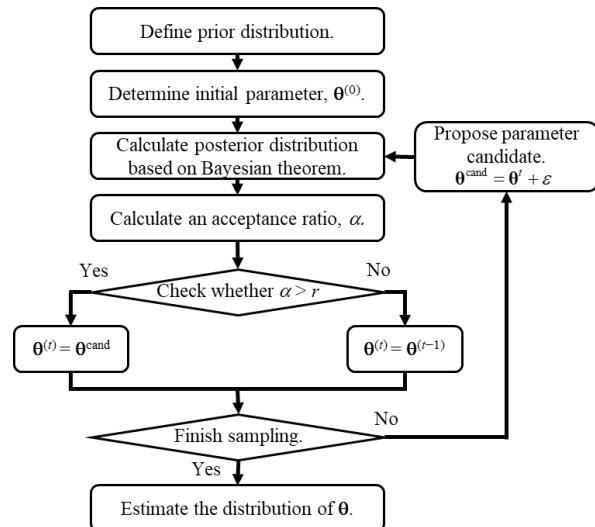


Fig. 1 Flowchart of the MCMC based on the MH algorithm. θ , D , t in this figure expresses the parameters vector, experiment/observation data, iteration of sampling, respectively.

4. 数値実験

本章では、MCMC法を用いたパラメータ推定手法の妥当性を検証するために、NEMPFシミュレーションによって得られたCおよびMn濃度分布を疑似的な実験データとして、既知の界面パーミアビリティを推定し、疑似実験データに含まれる不確実性を評価する数値実験を行う。

(1) 擬似実験データの作成および数値実験の条件

パラメータ推定に用いる観測データを作成するために、Fe-0.19C-1.00Mn (wt.%) 合金を、700 °Cで25秒間等温保持する $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態の1次元シミュレーションを行う。**Figure 2**の0 sに、計算開始時点の α 相の結晶粒を表すPF変数 ϕ_α のプロファイルを示す。本稿では、 ϕ_α が0.5以上の領域を α 相とする。計算領域は全長4.0 μm の1次元領域とし、格子点数40で規則分割する。計算領域左端に幅0.5 μm の α 相を設け、これが成長する過程を計算する。初期濃度は、計算領域全域において平均化学組成で一定とする。**Table 1**に、本シミュレーションに使用する物性値およびパラメータを示す。フェーズフィールドモビリティ $M^{\phi_{ij}}$ 、粒界エネルギー σ_{ij} は、それぞれ文献値^{[5][10]}を用いる。界面パーミアビリティの真値は、計算安定性確保のため、C, Mnとともに $1.0 \times 10^{-11} \text{ cm}^3/(\text{J}\cdot\text{s})$ とする。

Figure 2に、0 s, 12.5 s, 25 sのPF変数 ϕ_α のプロファイルを示す。時間経過とともに α 相が成長することがわかる。**Figure 3**に、0 s, 12.5 s, 25 s時点のC濃度プロファイルを示す。 α 相からC元素が吐き出され、 γ 相に分配していることがわかる。**Figure 4**に、0 s, 12.5 s, 25 s時点のMn濃度プロファイルを示す。Mn濃度は α 相から γ 相に分配するが、 α/γ 界面の移動速度と比較してMnの拡散速度が緩やかであるため、計算初期に計算領域左側に形成したMnの濃度スペイクが残留することがわかる。本研究では、FE-EPMA等の実験から取得し得る、計算終了時点のCおよびMn濃度プロファイルを用いて疑似実験データを作成する。

取得したC, Mn濃度は、それぞれ 10^{-4} オーダー、 10^{-2} オーダーと大きく異なるため、それぞれ標準化を行い、同程度のスケールに調整する。その後、仮想的な実験誤差として標準偏差 $\varepsilon = 0.1$ の正規乱数を付与し、これを疑似実験データとする。

界面パーミアビリティの事前分布には、最小値0、最大値 $1.0 \times 10^{-10} \text{ cm}^3/(\text{J}\cdot\text{s})$ の一様分布を、仮想実験誤差 ε の事前分布には、擬似実験データやパラメータの推定値の外れ値に対応できる、最頻値0の半コーシー分布を使用する。界面パーミアビリティの初期値は、C, Mnとともに、真値の半分である $5.0 \times 10^{-12} \text{ cm}^3/(\text{J}\cdot\text{s})$ とする。界面パーミアビリティの提案分布の標準偏差は、ともに $7.5 \times 10^{-13} \text{ cm}^3/(\text{J}\cdot\text{s})$ とする。仮想実験誤差 ε の初期値および提案分布の標準偏差は、それぞれ1.0, 0.025とする。推定値から初期値依存性を除去するためのburn-in期間は100回とする。以上の条件において、2500回のサンプリングを行う。すなわち、パラメータ推定に使用するサンプル数は2400である。

Table 1 Physical values and parameters used in the NEMPF simulation of austenite-to-ferrite transformation.

Physical value or parameters	Value
Grid size, Δx	0.100 μm
Number of grids	40
Time increment, Δt	$5.00 \times 10^{-5} \text{ s}$
Total calculation time	25.00 s
Temperature, T	973.15 K
Pressure, P	$1.01 \times 10^5 \text{ Pa}$
Molar volume of Fe, V_m	$7.09 \times 10^{-6} \text{ m}^3/\text{mol}$
Thickness of interface, δ	0.70 μm
Interface energy, σ_{ij}	0.50 J/m ²
Phase-field mobility, $M^{\phi_{ij}}$	$1.38 \times 10^{-14} \text{ m}^4/(\text{J}\cdot\text{s})$
Permeability of C atom, P^C	$1.00 \times 10^{-11} \text{ cm}^3/(\text{J}\cdot\text{s})$
Permeability of Si atom, P^{Mn}	$1.00 \times 10^{-11} \text{ cm}^3/(\text{J}\cdot\text{s})$

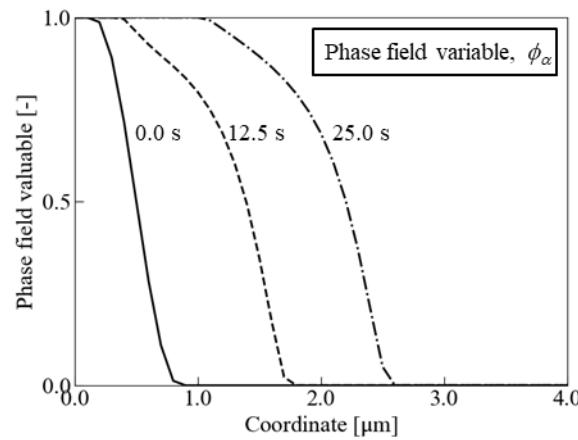


Fig. 2 Profiles of the phase field variable at 0.0 s (solid line), 12.5 s (dotted line), and 25 s (dash-dotted line) during the isothermal austenite-to-ferrite transformation at 700 °C in a Fe-0.19C-1.00Mn (wt.%) alloy, obtained from NEMPF simulation.

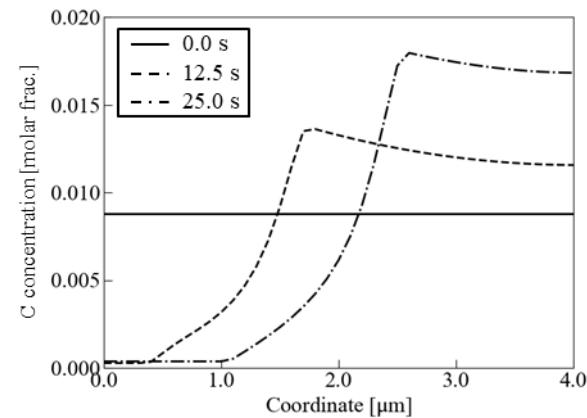


Fig. 3 Profiles of the C concentration at 0.0 s (solid line), 12.5 s (dotted line), and 25 s (dash-dotted line) during the isothermal austenite-to-ferrite transformation at 700 °C in a Fe-0.19C-1.00Mn (wt.%) alloy, obtained from NEMPF simulation.

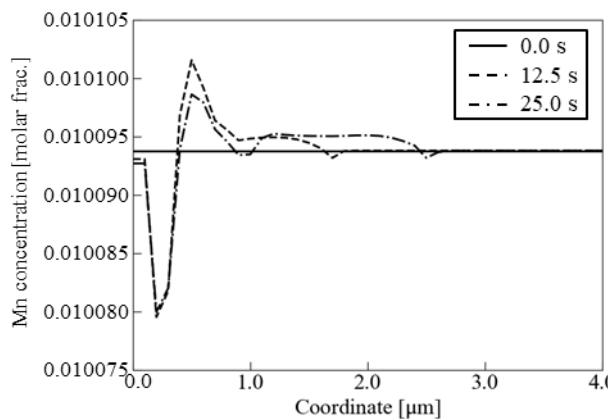


Fig. 4 Profiles of the Mn concentration at 0.0 s (solid line), 12.5 s (dotted line), and 25 s (dash-dotted line) during the isothermal austenite-to-ferrite transformation at 700 °C in a Fe-0.19C-1.00Mn (wt.%) alloy, obtained from NEMPF simulation.

(2) 数値実験の結果

Figure 5(a)に、MH法により受諾された、Cパーミアビリティの頻度分布を示す。正規分布のような概形を持っており、平均値は $9.3 \times 10^{-12} \text{ cm}^3/(\text{J}\cdot\text{s})$ 、標準偏差は $5.8 \times 10^{-13} \text{ cm}^3/(\text{J}\cdot\text{s})$ であった。平均値は真値と比較して6.6 %の相対誤差に収まっており、高精度に推定できたといえる。誤差が生じた原因是、擬似実験データを作成する際に正規乱数として与えた仮想的な実験誤差に偏りがあったことが原因であると考える。また、標準偏差が真値の5.82 %と小さいことから、推定値の信頼度が高いことがわかる。

Figure 5(b)に、Mnパーミアビリティの頻度分布を示す。Cパーミアビリティと同様、正規分布のような概形を持っており、その平均値は $1.1 \times 10^{-11} \text{ cm}^3/(\text{J}\cdot\text{s})$ であった。平均値の真値との相対誤差が9.6 %であり、標準偏差が $6.3 \times 10^{-13} \text{ cm}^3/(\text{J}\cdot\text{s})$ であったことから、Cパーミアビリティと比較してやや大きな誤差を持っており、不確実性も大きいことがわかる。これは先述した仮想的な実験誤差(正規乱数)の偏りが影響していると考える。

仮想実験誤差 ε の頻度分布を**Fig. 5(c)**に示す。パーミアビリティの頻度分布とは異なり、値の大きい方向(紙面右側)に向かって裾の長い分布が得られたことがわかる。これは、事前分布に、同じく裾の長い分布形状を持つ半コーシー分布を設定したことが原因であると考える。また、仮想実験誤差 ε の最頻値は0.10付近の値であることから、仮想実験誤差 ε に関しても高精度に推定できたといえる。擬似実験データ作成時の仮想実験誤差 ε の大きさが推定可能であることから、実際の実験データを使用したパラメータ推定と並行して、実験値の不確実性を評価できると考える。

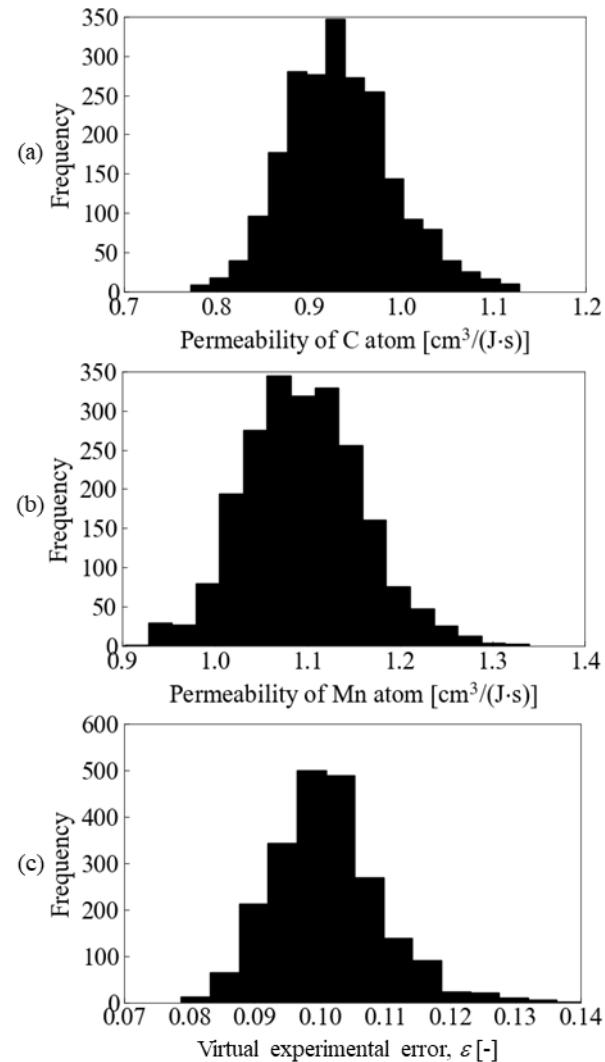


Fig. 5 Frequency distribution of (a) permeability of C atom, (b) permeability of Mn atom and (c) virtual experimental error, ε calculated by the Metropolis-Hastings algorithm. The initial 100 iterations are declared as a burn-in sequence.

(3) 推定したパーミアビリティの妥当性検証

前節にて推定したCおよびMnのパーミアビリティの妥当性を検証するために、推定したパーミアビリティを使用したNEMPFシミュレーションを行い、真値を使用したNEMPFシミュレーションから得られたC, Mn濃度プロファイルと比較する。本稿では、パーミアビリティの推定値として、**Fig. 5(a), (b)**に示す頻度分布の平均値を使用する。パーミアビリティを除く計算条件は、4.1節で先述したものと同様とする。

Figure 6に、0 s, 12.5 s, 25 s時点のC濃度プロファイルを示す。真値を使用した場合の結果を実線、推定値を使用した場合の結果を点線で示す。点線が確認できないが、これは両者が一致しているためである。よって、推定値を使用したNEMPFシミュレーションにより、真値を使用した場合のC濃度分布を再現可能であることが分かる。

Figure 7に、0 s, 12.5 s, 25 s時点のMn濃度プロファイルを示す。真値を使用した場合の結果を実線、推定値を使

用した場合の結果を点線で示す。C濃度と同様、両者が一致するため点線が視認できない。したがって、推定値を使用したNEMPFシミュレーションにより、真値を使用した場合のMn濃度分布を再現可能であることが分かる。以上より、推定したC, Mnの界面パーミアビリティの妥当性が示された。

本研究で構築したパラメータ推定手法を用いることで、実際に測定したCおよびMnの濃度分布に基づき界面パーミアビリティを推定することができる。これにより、溶質濃度の分配挙動が $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態挙動に及ぼす影響を解明することにつながると考える。

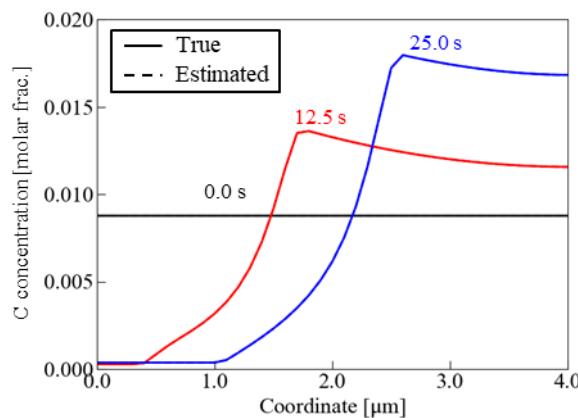


Fig. 6 Profiles of the C concentration at 0.0 s (black line), 12.5 s (red line), and 25 s (blue line) during the isothermal austenite-to-ferrite transformation at 700 °C in a Fe-0.19C-1.00Mn (wt.%) alloy, obtained from NEMPF simulation. The solid line shows the result obtained using true value of permeability and the dotted line shows the result using estimated permeability.

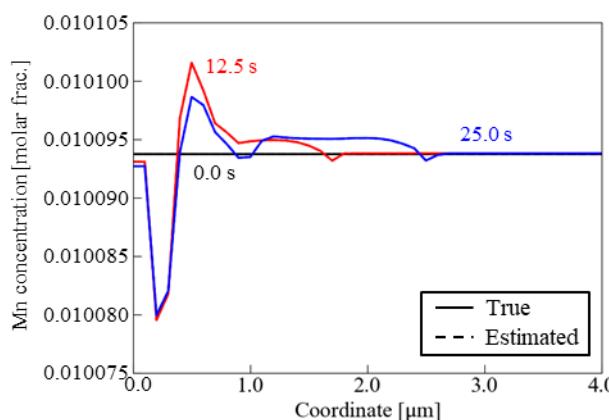


Fig. 7 Profiles of the Mn concentration at 0.0 s (black line), 12.5 s (red line), and 25 s (blue line) during the isothermal austenite-to-ferrite transformation at 700 °C in a Fe-0.19C-1.00Mn (wt.%) alloy, obtained from NEMPF simulation. The solid line shows the result obtained using true value of permeability and the dotted line shows the result using estimated permeability.

5. 結言

本稿では、MCMC法の代表的な手法の一つであるMH法を用いた数値実験により、C, Mnの濃度分布から、NEMPFモデルに含まれるC, Mn界面パーミアビリティを推定可能であることを示した。数値実験により、界面パーミアビリティの不確実性が小さく、推定値の信頼度が高いことを示した。また、擬似実験データに与えた仮想実験誤差の大きさを推定できたことから、実際の実験データを用いたパラメータ推定と同時に、実験データの不確実性を評価できる可能性があることを示した。本研究で構築したパラメータ推定手法は、 $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態挙動の高精度予測に資するものである。

参考文献

- [1] Goune M., Danoix F., Agren J., Brechet Y., Hutchinson C. R., Militzer M., Purdy G., van der Zwaag S., Zurob H.: Overview of the current issues in austenite to ferrite transformation and the role of migrating interfaces therein for low alloyed steels, *Materials Science and Engineering, R. Reports*, Vol. 92, pp. 1-38, 2015.
- [2] 山下孝子, 田路勇樹, 野呂寿人: 拡散シミュレーションによるSi, Mn添加鋼の $\alpha \rightarrow \gamma$ および $\gamma \rightarrow \alpha$ 相変態挙動の解析, 日本金属学会誌, Vol. 75, No. 7, pp. 398 - 405, 2011.
- [3] Yamashita T., Enomoto M., Tanaka Y., Matsuda H., Okuda K.: Effects of Alloy Elements on Carbon Partitioning in Early Stages of Proeutectoid Ferrite Transformation in Low Carbon Mn-Si Steels, *ISIJ International*, Vol. 60, No. 2, pp. 369 – 376, 2020.
- [4] 山中晃徳, 三好英輔: Pythonによるフェーズフィールド法入門 基礎理論からデータ同化の実装まで, 丸善出版株式会社, 2023.
- [5] Militzer M., Mecozzi M., Sietsma J., van der Zwaag S.: Three-dimensional phase field modeling of the austenite-to-ferrite transformation, *Acta Materialia*, Vol. 54, pp. 3961 - 3972, 2006.
- [6] Lv S., Wu H.-H., Wang K., Zhu J., Wang S., Wu G., Gao J., Yang X.-S., Mao X.: The austenite to polygonal ferrite transformation in low-alloy steel: multi-phase-field simulation, *Journal of Materials Research and Technology*, Vol. 24, pp. 9630 – 9643, 2023.
- [7] Fan L., Dong H., Yang L., Yang Z., Chen H.: The Role of Interfacial Coherency in the Kinetics of Austenite to Ferrite Transformation in Fe-C-M Alloys: A Phase Field Study, *Metallurgical and Materials Transactions A*, Vol. 54, pp. 1055 - 1061, 2023.
- [8] Steinbach I., Zhang L., Plapp M.: Phase-field model with finite element dissipation, *Acta Materialia*, Vol. 60, No. 6, pp. 2689 - 2701, 2012.
- [9] Zhang L., Steinbach I.: Phase-field model with finite

- element dissipation: Extension to multi-component multi-phase alloys, *Acta Materialia*, Vol. 60, No. 7, pp. 2702 - 2710, 2012.
- [10] Segawa M., Yamanaka A., Nomoto S.: Multi-phase-field simulation of cyclic phase transformation in Fe-C-Mn and Fe-C-Mn-Si alloys, *Computational Materials Science*, Vol. 136, pp. 67 - 75, 2017.
- [11] 花田政範, 松浦壯: ゼロからできる MCMC-マルコフ連鎖モンテカルロ法の実践的入門-, 講談社, 2021.
- [12] Noii N., Khodadadian A., Ulloa J., Aldakheel F., Wick T., François S., Wriggers P.: Bayesian inversion for unified ductile phase-field fracture, *Computational Mechanics*, Vol. 68, pp. 943 - 980, 2021.
- [13] Liu Z. K.: Thermodynamics and its prediction and CALPHAD modeling: Review, state of the art, and perspectives, *Calphad*, Vol. 82, 102580, 2023.
- [14] Francfort G. A., Marigo J. J.: Revisiting brittle fracture as an energy minimization problem, *Journal of Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 46, pp. 1319 - 1342, 1998.
- [15] Metropolis N., Rosenbluth A. W., Rosenbluth M. N., Teller A. H., Teller E.: Equation of State Calculations by Fast Computing Machines, *Journal of Chemical Physics* Vol. 21, pp. 1087 - 1092, 1953.
- [16] Hastings W. K.: Monte Carlo Sampling Methods Using Markov Chains and Their Applications, *Biometrika*, Vol. 57, pp. 97 - 109, 1970.
- [17] 豊田秀樹: 基礎からのベイズ統計学: ハミルトニアンモンテカルロ法による実践的入門, 朝倉書店, 2015.
- [18] 伊庭幸人, 種村正美, 大森裕浩, 和合肇, 佐藤整尚, 高橋明彦: 計算統計 II マルコフ連鎖モンテカルロ法とその周辺, 岩波書店, 2005.