フレームデータモデルによる機械材料データの記述*

小 野 陽*¹

Representation of Industrial Material Data with Frame Data Model

Noboru ONO

The examination of structural characteristics contained in the description of experimental results on the mechanical properties of engineering materials which are often subjected to complex thermomechanical treatments has shown that these data will be well represented with a data model based on Minsky's frame. An important task required for such a representation is to find appropriate frame designs for individual items in material data descriptions. The designs of some basic frames, such as those for material data, specimen, material, heat treatment, properties, etc., are proposed and discussed. The experimental description of material data in literature with the frame data model has indicated that its expressive power is enough for representing every detail of original data, except for the case where the original data itself is ambiguous. If the frame design, including the choice of the names of frames and slots, is appropriately made, it may play the role of a common description language for a wide range of material data.

Key Words: Material Testing, Artificial Intelligence, Database System, Material Database, Frame, Data Model

1. はじめに

機械材料、あるいはより一般的に工業的に用いられる材料の諸特性についての計算機データベースが機械、構造物の開発、設計や管理をはじめ材料の信頼性評価⁽¹⁾、材料開発⁽²⁾⁽³⁾などの様々な分野で役立つ事は言うまでもなく、実際に疲労強度データ⁽⁴⁾⁽⁵⁾、高温強度データをはじめ様々な諸特性のデータベースの構築が行われている。しかしながら純物質の基礎物性値のデータベース化を行うのに比べて、機械材料の諸特性、その中でも特に問題となる機械的性質のデータベースの構築には特別な問題が伴う⁽¹⁾⁽⁶⁾。すなわち、工業的な材料の組織はその製造方法や処理の履歴によって異なり、それに従って特性も異なるから、それらを簡単な呼び名で区別する事が出来ない。さらにひとつの材料の特性値は温度や雰囲気などの環境によって大きく変化する場合がある。またある特性値を得るのに用いた試験片や試験の方法、さらには特性値の定義までもが異なる場合がある。

このような材料データの構造は同じ書式で整理できる多数のデータを効率よく処理する事を目的とする通

常のデータベースシステムの枠組みになじまない。そのため現在の材料データベースはある範囲の材料の標準的なデータだけを扱うことにするか、検索を大まかなものにするなどその機能に大きな制限を受けている。

このような問題を解決するためにはより柔軟なデータ構造を持ったデータベースシステムの実現が必要と考えられるが、それには先に考察したように⁽⁷⁾人工知能の分野で用いられるMinskyのフレーム⁽⁸⁾⁽⁹⁾が基本的なデータ構造として適しているように思われる。そこで我々はフレームに基づくデータベースシステムを試作し、実際の材料データを計算機に記録し、検索を行う実験を行なっている。本報告ではフレームを用いたデータモデルの表現能力について考察し、フレームの利用によって原論文に含まれる事項のほぼ全てを忠実に記録できることを述べる。このためには現実の材料データの記述をフレームを用いて解釈することが必要であるが、これが材料の振舞いについての専門的な知識を必要とし、またこのようなデータベースの表現と検索の能力や使いやすさを決定づける重要な作業であることを強調する。さらに、フレームデータモデルが適切なフレームのデザインと語彙をともなつて幅広い材料のデータベースのための共通言語となる可能性を示唆する。

* 平成2年9月23日 第68期全国大会講演会において講演、原稿受付 平成2年10月23日。

*¹ 正員、東北大学工学部 (〒980 仙台市青葉区荒巻字青葉)。

2. 関係データベースとフレーム型データベース

現在最も広く用いられている関係データベースによって材料データを処理しようとしたときの問題点は次のような非常に簡単な例でも明かである。すなわち、次の2つの材料の記述

例1: 「973Kで1800s焼鈍したTi」

例2: 「室温で50%圧延した後、973Kで1800s焼鈍したTi」

を考える。例1では記録すべき項目は明らかに素材名、処理名、処理温度、処理時間の4つである。これを関係データベースの用語⁽¹⁰⁾で言えば特定の材料はこれらの4つの属性を持つ関係スキーマ、材料(素材名、処理名、処理温度、処理時間)を用いてデータベースに記録される。一方、例2から抽出される属性はこれとは種類も数も異なっているから同じ関係スキーマを用いて記述することが出来ず、したがってひとつのデータベースに収めることが出来ない⁽¹¹⁾。このことは放射線照射を受けた材料の特性のデータベースを作った野上ら⁽²⁾がすでに体験している。現実的な方法のひとつとしてそのように均質な表に収まらない情報はコメント欄にテキストデータとして記録し、データベース利用者まで届けることが行われる。その時は、例えば酸化物超伝導材料のデータベース⁽¹²⁾のように超伝導特性に影響を及ぼす焼鈍条件の違いが検索の段階では十分に弁別されず、検索されたデータを見て利用者がその違いを区分することになる。

これらの例をフレームを用いて記述する場合を次に考えよう。まず材料の記述が素材名とそれに与えられた処理という2つの属性を共通の構成要素として持っていることに注目する。そこで材料のフレームを素材と処理をスロットとして

F1: 材料(素材, 処理)

のように定義する。処理には焼鈍と圧延が現れているが、同様にそれらのフレームを定義すれば

F2: 焼鈍(温度, 時間)

F3: 圧延(温度, ひずみ量)

となる。これらのフレームの各スロットに具体的な値、スロット値を与えたものがこれらのフレームで記述される事物の具体例あるいはフレーム表現である。ここでそのような具体例が他のフレームのスロット値となることを許す。すると例1, 2はそれぞれ次のO1, O2のようにフレーム表現できる。

O1: 材料(素材 = Ti, 処理 = O4)

O2: 材料(素材 = O3, 処理 = O4)

ここでO3, O4, O5はそれぞれ

O3: 材料(素材 = Ti, 処理 = O5)

O4: 焼鈍(温度 = 973K, 時間 = 1800s)

O5: 圧延(温度 = 室温, ひずみ量 = 50%)

のようなフレーム表現である。

このように関係データベースではひとつの記録は属性の値を一列に並べたものであるのに対して、フレーム表現ではひとつの幹から次第に枝分かれして行く木構造を持っている。この時の枝を必要に応じて選ぶことで、細部の記述を計算機が弁別できる形で保持しながらかつ異なった記述項目を持つデータをひとつのデータベースによって扱うことが可能になる。さらにO2の記述で分かるように、素材に与えられた処理の順序が事実の通りに自然に表現されている。またひとつの素材についてある処理の前後の性質を比較するような実験の結果も正しく記述できることになる。

3. フレームによる材料データの記述

このようにフレームデータモデルの採用は様々になる材料データを統一的に扱うことを可能にするものと期待されることから、それを実際の材料データに適用したときの記述と検索の能力、それに問題点を明らかにするために、フレーム構造を扱うデータベースプログラムを試作し、データの記録と検索の実験を行っている。プログラミング言語には PROLOGを用いているが、その理由は述語論理に基づく文法が簡明であること、またデータベース、探索、マッチング、木構造を記述するリストの処理など本研究での実験に必要な基本機構をすでに備えていること⁽¹³⁾⁽¹⁴⁾などである。

3.1 PROLOGでのフレームの取扱い PROLOGによってフレームとそれを用いた事物のフレーム表現を取り扱うには様々な形式が可能であるが⁽¹⁴⁾、本研究で用いた形式は次のようである。まずひとつの事物のフレーム表現は

[FRAME_NAME, SLOT_LIST]

のように2項リストとする。このようなひとまとまりの表現をオブジェクトと呼ぶことにする。FRAME_NAMEはこのフレームの名前、SLOT_LISTは

[[SLOT_NAME1, SLOT_VALUE1],
[SLOT_NAME2, SLOT_VALUE2],]

のようにスロット名 SLOT_NAME_nとスロット値 SLOT_VALUE_nからなる2項リストのリストである。

スロット値は記録されるべきデータの構成要素で、それぞれ何らかのオブジェクトである。例えば、温度のスロット [temperature, 973] でのスロット値 973のように数値であったり、冷却速度のスロットでの [cooling_rate, air_cooling] のようにPROLOGアトム

あるいは文字列もオブジェクトと呼ぶ。また例えば数値 973 の代わりに数値範囲 950 から 1000 を記述するときは、数値範囲のフレーム `range(min,max)` を定義し、それを用いた表現、

```
[range,[[min,950],[max,1000]]]
```

を数値と対等の資格のオブジェクトとしてスロット値に与えて良い。

データベースはフレーム表現された材料データというオブジェクトを記憶したものに他ならないが、それ以外にもオブジェクトを記憶しておきたいことがある。例えば同じ材料についての様々な条件でのデータがある時や、同じ素材に様々な処理を与えた材料の性質のデータがある時などは、一つのオブジェクトを記憶し、それを他の複数のフレームでスロット値として引用する。物理的に同一であったものは計算機内の記録においても同一のオブジェクトであることは筋が通っているし、それはまた入力誤りを訂正するときに極めて好都合である。そのようなオブジェクトはPROLOGの事実節として

```
object(ID,FRAME_NAME,SLOT_LIST)
```

のように記録することにする。ここで ID は他のオブジェクトの中でスロット値として参照するための番号である。

3.2 材料データの記述 通常の材料試験結果の報告には素材の製造方法、化学組成、熱間加工や熱処理の履歴、試験片の形状寸法、試験方法それに実験の結果が文章、表、図などによって記述されている。その中に現れる事項を拾い上げて必要なフレームを定義し、それらをフレーム名とそのスロットあるいはスロット名-スロット値という関係で結び付けることで材料データのフレーム表現が作られる。この時、元の記述が自然言語を用い、さらに必要に応じて表や図、それらの中の注記などを用いることが出来るのに対して、フレームによるオブジェクトの構成規則が許す構文は著しく単純であるから、実際の材料データの内容を忠実に記録できるようにするにはかなりの考慮と工夫が必要であり、特に適切なフレームの定義が重要である。以下では文献の材料データをフレームにより記述した例を挙げてフレームの表現力を例証するとともに、フレームの定義という作業の内容を明らかにする。

用いた例は比較複雑な素材の処理履歴を持つ粉末冶金 Ti-6Al-4V合金の低サイクル疲労の実験結果⁽¹⁵⁾である。その中で HIPした素材に熱間での型鍛造と焼鈍を加えた材料のSN曲線上のひとつの実験点を記録したPROLOG節を図1に示した。単純な構文規則にしたがう必要から人工的と思われる所もあるが、記述の内

容は明かであろう。基本的に元の記述の全てを忠実に再現することを試みたが一部そうでいていないところもある。それも含めていくつかのフレームについて以下に説明する。

a. データ データのフレームを

```
data(specimen, environment, property)
```

と定義したが、普通の報告でのように供試材とその組成、処理、試験片、試験方法、結果のようなスロットが現れるのが自然だという意見も有り得る。この定義を選んだ理由は実験結果は試験片から得られるのであって、材料から直接に得られることはないという物理

```
object(data,d005,
  [ {specimen,object(s003)},
    {property,object(p006)}}).

object(specimen,s003,
  [ {made_of,object(m005)},
    {process,
      [machining,
        [geometry,
          [round_bar,
            [gauge_diam,3],
            [gauge_length,12]]],
          [direction,longitudinal]]]]]).

object(fatigue_life,p006,
  [ {stress_condition,
    [simple_cyclic_stress,
      [ {loading_mode,axial},
        {stress_ratio,0},
        {amplitude,840},
        {frequency,0.15}]]],
    {cycles_to_failure,1e4}])).

object(material,m005,
  [ {process,
    [heat_treatment,
      [ {temp,1193}, {duration,14400},
        {cooling_rate,furnace_cooling}]]],
    {raw_material,object(m004)}}).

object(material,m004,
  [ {process,
    [channel_die_forging,
      [ {strain,0.54},
        {soak_temp,1223},
        {soak_time,1800},
        {die_temp,1223}]]],
    {raw_material,object(m003)}}).

object(material,m003,
  [ {name,$ti-6al-4v$},
    {process,object(h001)},
    {chemical_composition,
      [chemical_composition,
        [ {ti,bal}, {al,6.1}, {v,4.1},
          {fe,0.21}, {c,0.01}, {n,0.026},
          {o,0.198}, {w,0.004}]]],
    {raw_material,object(pd01)}}).

object(hip,h001,
  [ {temp,915},
    {duration,21600},
    {pressure,1},
    {geometry,
      [cylinder,
        [ {diam,95}, {length,200}]]]]]).

object(powder_material,pd01,
  [ {name,$prealloyed REP powder$},
    {made_from,[material,[{name,$Ti-6Al-4V$}]]],
    {process,$rotating electrode process$})).
```

図1 HIPと熱間型鍛造を受けた粉末冶金Ti-6Al-4V合金の低サイクル疲労の実験点のフレーム表現を記録したPROLOGの事実節。

的事実による。これによって試験片の寸法や表面のあらさなどが結果に影響を及ぼすことがあることが強調される。さらに、熱処理や表面処理が試験片に加工された後に与えられることがあるがそれが

```
[specimen,[[made_of,SPECIMEN#1],
[process,[heat_treatment,HEAT_TREAT#1]]]]
```

のように自然に表現できる。

b. 材料 2で述べた素材と与えられた処理プロセスのほかに化学組成と呼び名を加えて

```
material(name,process,
chemical_composition,raw_material)
```

というフレームとした。何段階かの処理を受けた材料は各処理の前後でそれぞれ異なったものであり、場合によっては処理の前後で化学組成が変化するかも知れない。しかし普通素材の化学分析は処理履歴のどこかの段階で一度だけ行われる。この例ではHIPしたままの材料が分析されており、その事実の通りにその材料、object(m003)、にだけ化学組成の記述を付けた。それ以後の素材の化学組成は与えられていないのでスロットごと省略してある。

ある材料の素材という連鎖を追っていくと、最終的にある与えられた材料に行き着く。多くの機械材料の性質の報告ではいわゆる受け入れ材がそれであり、その処理履歴を問わないで名前と化学組成が記述されていることが多い。それは例えば

```
[material,[[name,'S45C'],
[chemical_composition,CHEM_COMP#1]]]
```

のようなオブジェクトになる。今の例ではTi-6Al-4Vが名前であり、HIPによってバルク材となったものにこれを付けた。それ以後の処理後の材料も当然Ti-6Al-4Vであるが、余りに当然なので省略してある。

材料の化学組成と名前のこのような欠落は人間が図1を見てそれが「ある化学組成を持つ、HIPしたTi-6Al-4V」であることを認識する障害にはならず、むしろ自然である。これは「この処理によって材料の呼び名と化学組成は変わらない」という常識によって欠落したスロットが補われるためであり、その常識にも関わらず処理の各段階の材料についてその名前と化学組成を問うことは極めてわずらわしい。一方このような欠落したスロットを残すことによりデータの検索において生じる問題については後で簡単に触れる。

c. 熱処理 2で焼鈍のフレームについて大ざっぱに述べたが、実際の熱処理の記述はもっと複雑である。まず一般に熱処理は温度-時間曲線のプロファイルで記述できる。あらゆる場合を記述できるという目標からはずれることになるが当面単純な熱処理だけを

考えることにすれば、そのプロファイルは加熱速度、保持温度、保持時間、それに冷却速度で記述され、これをフレームで記述することは容易である。ただし加熱速度が問題とされ、実際に記述されていることは減多にない。また同じ温度-時間プロファイルが場合によって様々な名前、すなわち熱処理、焼鈍、溶体化処理、時効、焼入れ、焼きもどしなどと呼ばれることがある。データの検索が温度履歴で行われる場合と名前で行われる場合の両方が有り得るだろうから、これらの言葉もデータベース中のオブジェクトにも書き込んでおくのがよいと考えられる。

以上の他に熱処理の記述にはその雰囲気のスロットがぜひ必要である。これらから一般に熱処理のフレームは

```
heat_treatment(name, temperature,
duration, cooling_rate, atmosphere)
```

と定義してよいだろう。今扱っている例では熱処理の雰囲気の記事がなかったのでそのスロットは欠落している。

d. 加工 加工処理は熱処理と違って加工の方法ごとに記述が必要な属性の違いが大きいため、加工方法をフレーム名とした方がよいと思われた。今の例では原論文の記述からスロットを拾うと

```
channel_die_forging(die_temperature,
soak_temperature,soak_time, strain),
```

と書ける。

これを用いて作った図1のオブジェクトは原論文の記述と少し違っている。すなわち、実際には鍛造は3回に分けて行われ、1回目と2回目の素材加熱温度は1223Kではなく1398Kであった。ただし各回のひずみ量は与えられておらず、合計のひずみ量56%の「大半」が最後の低い温度で与えられたと書かれている。元の記述のあいまいさのうち「約30分」などの扱いにはファジー理論が参考になると考えられるが、この例のような入り組んだあいまいさについては別な対策が必要だと思われる。

e. 疲労寿命 特性のスロットのスロット値は今の場合疲労試験の方法と結果である。試験方法のうち試験片形状や試験環境は別に与えられているから、ここで記録すべき項目は与えられた負荷の記述とそれによる破断繰返し数である。負荷の記述は応力制御、ひずみ制御、多段応力振幅の実験など試験のモードごとに異なるから負荷の記述というスロットを別に設けるのが良いであろう。そこで次のようにした。

```
fatigue_life(stress_condition,
cycles_to_failure)
```

```
stress_condition =
  simple_cyclic_stress(loading_mode,
    wave_form, stress_ratio, amplitude).
```

スロット `wave_form` は図 1 の例では欠落しているが、通常は正弦波などの一語のオブジェクトか、あるいは台形波や矩形波であればそれぞれ必要なスロットを持つフレームで書かれたオブジェクトになる。

ひとつの条件の疲労試験ではひとつの実験点しか得られないという物理的事実にそのまま対応しているという意味で、この定義は理にかなっていると考えられるが、このようなオブジェクトからデータ点を集めてひとつの S-N 曲線を作る手続きが別に必要となる。

f. 物理量 温度、応力などの物理量の記述は数値と単位のふたつの要素を含み、これらをスロットとして例えば

```
stress = [stress, [[value, 184], [unit, mpa]]]
```

のように記録しなければ、検索における大小や包含関係の判定ができない。ここでは煩雑なので物理量ごとに用いる単位を統一し、例えば `[stress, 184]` が「184 MPa の応力」を意味することとしても良い。図 1 ではこの方法を用いてある。記録には後者の定義を用い、入出力では前者を用いて任意の単位を受け付けてその間の換算を計算機に行わせることは可能である。

5. ま と め

5. 1 データの検索と欠落したスロット 上の例からも明らかのように、フレーム型のデータ構造の採用はデータベースシステムの表現力を飛躍的に向上させる。このことはまた、そのままデータの検索におけるデータの識別能力の向上に結びつく。すなわち、一般にデータベースの検索は検索者の興味に含まれるデータを採り出すことと言って良いが、この時の検索者の興味の表現にもデータの記述と同じデータ構造が用いられるからである。このように詳細な検索が可能になることは、検索において用いられるマッチング規則と検索の結果についてそれだけ慎重な検討が必要であることを意味する。特にデータにおいて欠落したスロットがあることは微妙な問題を引き起こす。例えば「900K 以上で焼鈍した Ti」への興味は明らかに 2 の例 1 の材料を含む。一方、これが「900K 以上の温度で大気中で焼鈍した Ti」への興味に含まれるとすべきかどうかは問題である。前節で見たように原情報においてすでに記述が欠落していることがしばしばある。元の記述をそのまま表現するという意味ではそれらをそのまま欠落したスロットとするのが最も良い。その時はしかし、それらを適当な常識によって補わないと正し

い検索結果が得られない場合がある。これはいわゆるデフォルト推論⁽¹⁶⁾に当たるが、データベースにおける記述を詳細なものにすることが推論の必要性につながることは興味深い。このことはフレームデータモデルを用いたデータベースでの検索のアルゴリズムとその論理について述べる機会により詳しく考察する。

5. 2 フレームデザイン フレームを用いたデータベースの表現と検索の能力は適切なフレームの定義によって初めて可能であるが、それは記録すべき項目の各々について行う細かな作業である。この時、材料自身とその特性についての元の記述の物理的な意味、フレームデータモデルの構文規則、検索におけるデータベースシステムの動作などが考慮されなければならない。また、データベース利用者、すなわちデータの入力者と検索者から見た分かりやすさも重要である。というのはデータあるいは問い合わせの入力は計算機が記憶しているフレームに沿って意図するオブジェクトを構成することで行われるからである。ひとつの事項についてのフレームの定義はしばしば幾通りにも考えられ、これらの要因を考慮しながら各定義の間の得失を検討する必要がある。その意味でこの作業をフレームデザインと呼ぶことにしよう。

一度定義したフレームあるいはその集まりはもしそれが十分に良いものであれば、さまざまに組み合わせられてさまざまなデータを記述するのに用いられる。その意味でフレームデザインはそこに現れるフレーム名、スロット名の語彙も含めて多数の利用者のコンセンサスを得たいわば材料データ記述のための共通言語となることが最も望ましい。このことはさまざまな機関や研究者が個別に作ったデータベースが統合され、共用されるという理想⁽¹⁷⁾の実現を目指すためにも重要である。さらに多くのデータの記述を試みる中で改善と充実を図っていく必要があるものの、本報告で述べたデータモデルとフレームデザインはそのような共通言語のためのひとつのプロトタイプである。

5. 3 次世代データベースシステム 現在の我々の実験システムはフレーム表現を受け入れ、その検索を行う実験のために必要な最小限の機能しか備えていない。しかし実用的なデータベースシステムとして利用するためにはデータベース管理や入出力機能の充実が不可欠である。我々のデータベースシステムもこれらの機能を逐次整備していくが、一方、これらの機能を備えた汎用データベースシステムが利用できれば最も都合が良い。Stonebraker⁽¹⁸⁾のまとめによれば現在研究あるいは開発されている次世代のデータベースシステムのプロトタイプの多くが nested-relational

データベース,あるいはほぼそれと等価なオブジェクト指向データベースに分類される。これらのデータベースでは nested-relational という形容からも想像されるようにひとつの関係スキーマのレコードが他のスキーマでのフィールドの値となることが許される。このようなデータ構造は本研究で用いたフレームに他ならず,したがって本研究のデータモデルによる材料データベースが近い将来それらのシステムを用いて実現できる可能性がある。その時でも,ここで述べたようなフレームデザインは基本的にそのまま用いることができるだろう。また一方で,材料データの柔軟な記録と細かな検索を可能にするために必要なデータ記述形式や検索規則は,それらの次世代データベースシステムに対する仕様要求と考えることもできる。

文 献

- (1) 西島, 機誌, 90(1987), 1296.
- (2) 野上, 岩田, 新材料開発と材料設計学, 三島編, ソフトサイエンス社, (1985), 444.
- (3) 岩田, 機誌, 89(1986), 1335.
- (4) 金尾, 材料, 29(1980), 957.
- (5) 石井, 二瓶, 金沢, 西島, 材料, 39(1990), 1285.
- (6) 山内, 小野寺: 情報管理, 27(1984), 674.
- (7) 小野, 人工知能学会全国大会(第3回)論文集, (1989), pp.247.
- (8) M. Minsky, A Framework for Representing Knowledge, in *the Psychology of Computer Vision*, P.H. Winston, ed., McGraw-Hill, (1975).
- (9) 大須賀 編, 知識ベース入門, オーム社, (1986).
- (10) J.D. Ullman (国居, 大保 訳), データベース・システムの原理, 日本コンピュータ協会, (1985).
- (11) W. Kent, ACM Trans. Database Systems, 4(1979), 107.
- (12) 浅田, 日本金属学会報, 29(1990), 754.
- (13) 白井, 辻井, 岩波講座情報科学22, 人工知能, 岩波書店, (1982).
- (14) I. Bratko, *PROLOG, Programming for Artificial Intelligence*, Addison-Wesley, (1990).
- (15) D. Eylon, et al., Metall. Trans., 14A(1983), 2497.
- (16) R. Reiter, Artificial Intelligence, 13(1980), 81.
- (17) 小野寺, 愛宕, 鉄と鋼, 71(1985), 1726.
- (18) M. Stonebraker, IEEE Trans. Knowledge and Data Engineering, 2(1990), 1.