金属材料設計への試み

岩田 修一* 三島 良 績**

1. 緒 言

昔からの合金開発のいきさつを調べてみると、折角の先輩の諸経験を十分に利用しきっていないで、ご本人の経験とカンにより見当をつけてやっていることが多い。これではいけないことは誰が考えても明らかで、合金学もこの辺で過去のあまたの合金開発に関する経験と知識を集大成し、これを所望の特性を持った合金を開発するという目的に使いやすいように集めて整理し、必要に応じて目的に合った情報を引き出しやすくすること、さらには過去の諸先輩の合金開発をしたときの考え方の筋道を整理して、合金を設計する基本的手法を確立することが必要である。この目的のための仕事は大別して、(1)必要な合金についてのデータ集積貯蔵の作業と、(2)これを合金設計という仕事に都合のよいように検索利用するための標準手順の電算機コードの作成とに分けられる。

そこでわれわれのグループ† では(1)の情報収集については原子半径等の基本的物性値状態図、合金の物理的、力学的性質のデータ・ベース化、(2)については合金開発用手法の組織化を昭和45年より進めてきた。

金属材料設計とは、ある使用目的が与えられたとき、限定された利用できる資源、すなわち情報、人、技術、時間、資金などのもとで、その使用目的に適合した最良の金属材料を決定することである。この場合、人、技術、時間、資金などは、一義的なものではないので、ここでは金属材料情報と最適材料の決定方法とに議論を限定することにする。

“材料設計”の概念は、分子設計という形で高分子の分野で発展させられてきた。そして分子設計における基本的な論理を中枢にして、分析、合成の両面から実用的な材料設計への総合的な試みがなされているが、対象とする情報量が莫大で、複雑な情報処理を必要とするため、この分野の研究は計算機システムを利用したものが

多い。例えば、分析の分野では、長野⁽¹⁾、Buchanan⁽²⁾、合成の分野では、Sridharan⁽³⁾、Corey⁽⁴⁾、また物性値の推算を目的にしたものには米田のEROICA⁽⁵⁾システム等がある。これらのシステムの特徴は以下に示す4点に集約される。

(a) データとプログラムをそれぞれ独立させてある。膨大な量のデータは、磁気テープ・ディスク等の外部記憶装置に貯蔵され、実行時に必要なデータの検索は中間の変換表のファイルを介して行なう。このことはシステムの成長にとって極めて重要である。

(b) そのときまでに得られている材料に関する研究成果を基礎にした推論機能を持っている。一般に推論は演繹的推論と帰納的推論に大別される。前者の演繹的推論は、ある特性値を求めるための手法が確立している場合、つまり非常に操作回数が大きくなることはあっても、いつかは必ず正しい解に達する計算手順が存在する場合に適用される。つまりアルゴリズム⁽³⁵⁾に対応する。一方後者の帰納的推論は、ある仮説の一般化という論理の飛躍があるため、計算機によるこの推論をするためには、発見的プログラミング(heuristic programming)をする必要がある。この手法は一般に、必ずしも正しい解を与えることは保証しないけれども、経験や単純化などにより、正しい解あるいはそれに近い解に到達するまでの機械的操作の回数を大幅に減少させるような計算手順を作る方法である。この発見的プログラミング自身に従来成功した方策を記憶し分類する機能——学習機能——を持たせ、より有効なプログラムに自己を高めていくようにすることも可能である。これらの推論を適用することによって精度の高い、しかも計算可能な推算を行なうという努力が続けられている。

(c) 初歩的な計算機の使用方法である数値演算を行なう。

(d) 計算機と人間とが、実行中に相互に情報交換を行なえるような手段を持っている(Sridharanのシステムは例外)。この機能は、割込み機能を持ったTSS(Time Sharing System)、グラフィック・ディスプレイ等の端

* 東京大学工学部原子力工学科学振奨励研究員

** 東京大学教授；工学部原子力工学科
An Approach to Alloy (Designing) ; Shuichi Iwata,
Yoshitsugu Mishima Department of Nuclear Engineering,
Faculty of Engineering, University of Tokyo, Tokyo)
1976年2月17日受理

† CAAD-Iには、石野 乗助教授、定量金属組織学関係では、大久保忠恒助教授、新谷聖法、長田雅男、佐藤義則、村松 健の諸氏である。

末によって実現される。またこの機能を持ったシステムは、マン・マシン・システムと呼ばれ、関連因子が複雑で問題解決の手法が確立していないために、実行時にどうしても人間の柔軟な判断力を必要とする場合に採られるシステムである。

一方金属材料の分野では、計算機を主に数値演算の道具としてのみ利用した材料設計には、Breen⁽⁶⁾、渡辺⁽⁷⁾らの実用的な研究がある。また物理的教育用システムではあるが、金属材料設計用システムの設計の参考となるものには、Bork⁽³⁴⁾の研究があり、応力-歪線図に問題を限定したものとしては、Olshausen 氏⁽²⁶⁾のシステムが参考となり、理学的情報の工学への応用という観点から合金設計を論じたものには、Zackay 氏⁽¹⁷⁾の報告がある。金属材料設計のための、高分子の分野で見られるような、総合的なシステムが、今まで存在しなかったのは、金属材料のデータの質の多様性、情報量の膨大なこと、特性値の予測方法のあいまいさ、複雑さ等に起因している。もとより金属材料設計手法の確立は、一朝一夕にして成るものではないが、この目的のために成長していくシステムを作成することは意味のあることと考えられる。そこでこの目的のために我々のグループで作成した CAAD-I (Computer Aided Alloy Designing system-I) で得られた結果^{(8)~(14)}と、定量金属組織学に関する結果⁽¹⁵⁾⁽¹⁶⁾の概略を述べ、つぎにこれらの結果を基にして現在設計中の ADAM & EVE (Alloy Design by Automatic Modeling & Estimation of Values from Experimental data) システムの考え方を示したい。

データ・ベースに関する一般的議論は(18)~(21)、その応用例については(21)、(25)、(36)。マン・マシン・システムに関しては(22)~(24)、(27)、推論に関しては、(28)~(33)の文献を参照されたい。

2. 金属材料設計のための条件

総合的な金属材料設計を行なうためには、(i) 必要な情報を貯蔵、および検索する機能、(ii) 検索したデータをもとに、各種特性値の推算をする機能、(iii) 成功した方策例を学習する機能等が必要である。またこれらの機能の円滑な実行のために、マン・マシンの情報交換をするための機能を備えていることが望ましい。これらの4つの機能は、計算機関連の技術の適用により達成されるが、その組織的な実行はつぎの2つの最適な選択が可能かどうかにかかっている。

それは第1に大量のデータの中から、ある特性値の推算にとって意味のあるデータを選択することであり、第2に選択されたデータを使って特性値を予測する場合の最適な方法の選択である。もちろんこれらの選択条件は

所与のものではない。一般的には、“よい”データが十分ある領域で確かめられた推算方法を、“よい”データが不足している領域でためてみて、推算可能な領域の拡大を漸次ばかり、データの質の検証も同時に行なってシステム全体の改良をしていくことが必要である。

3. 金属材料設計のためのシステム

(1) CAAD-I による金属材料設計法

CAAD-I の機能は大別して、情報検索、内挿および外挿等の数値演算、グラフィック・ディスプレイおよび TSS 端末を利用したマン・マシンの情報交換、状態図の基本的パターンの認識、多変量解析、合金化の効果の予測等である。

これらの機能を利用した標準的な設計方策は、(i) 開発の基点となる材料の選定および、(ii) 基点の材料の改良の2つのプロセスからなる。これらのプロセスは、さらに細分化されて、

(i) 開発の基点となる材料の選定

(a) 材料に要求される特性および材料環境の指定、

(b) 指定された条件に適合するか、または適合する可能性を持った材料の選定、

(c) 各特性値にあらかじめ決められた重み係数と、各特性値との内積の値とによる基点となる材料の選定、

(ii) 基点の材料の改良

(d) 既存の合金化による材料の改良手法の適用、

(e) 状態図を参照することによる内挿および外挿によって近似を行なう部分空間の決定；換言すれば、2元系平衡状態図の中の相の境界を、完備な部分空間の境界とみなして、全空間のアナログ的な描像を得る、

(f) 新たに推算された特性値をもとにして、(c)の方法による評価、

からなる。蓄積した情報の種類、検索論理、検索効率を表1に、検索結果の一例を図1に示す。

CAAD-I の欠陥としては、(i) 加工、熱処理等の効果を考慮をしていない、(ii) 理論式および経験式の適用は、設計者にまかされている、(iii) 完備な部分空間を構成するときに使用するデータが少ない場合には、予測の精度が低く、逆に十分なデータが存在する場合には、極めて平凡な予測しかできない、(iv) 多変量解析の適用は設計者にまかされているため、設計者にはかなりの知識が要求される、(v) ディスプレイ装置のハード的な制約から、設計プロセス全体を一度に検査できない等がある。ただし(v)の欠陥は、表示可能な図形が多いシステム⁽²³⁾⁽²⁴⁾を使用することによって解決可能である。

一方 CAAD-I の長所としては、(i) そのときまでに CAAD-I を利用して合金を設計した例を参照すること

表1 CAAD-I のデータの種類, 検索論理および検索効率

データの種類	データ構造	写 像	効率	容量	註
基本的物性値	配列	$F_p: E^{104} \rightarrow V_p^{104}$	1	100	S, RU
状態図	ネットワーク	$F: No. \rightarrow$ 配列	20	1000	S, RU
合金データ	木構造	$F: E^2 \rightarrow$ ネットワーク	50	2000	DA, RU
ストラテジー	ネットワーク	$F_p: E^m \times P^m$ → データ 目 標 → ネットワーク	5	450	DA, OU

E: 元素名, V: 特性値, P: パラメータ, p : 特性名, S: 順編成ファイル, DA: 直接編成ファイル, RU: ほとんどファイルのレコードの更新は行なわない, OU: しばしば更新を行なう. 効率は, 端末を用いて検索条件の指定を行ってから, その結果が出力されるまでの平均待時間(sec)であらわし, 容量の単位は KB である.

図1 CAAD-I による検索例

(a) ストラテジー, (b) 物性値の検索例

が可能であるので, 経験者の開発手法が容易に学習できる, (ii) 状態図, 合金データ等の検索が非常に速くできる, またグラスフィク・ディスプレイを利用しているのでアナログの描像がつかみ易い, (iii) 適合する材料の選択にあたっては, 集合演算が容易で正確であるため, 可能性のある材料の選択もかなり自由にできる等がある. これらの長所の中で (ii) の長所は, 材料全体の特性の全体的な描像を得ることが重要な材料設計においては, 不可欠である.

(2) ADAM & EVE システムの考え方

CAAD-I で未解決のまま残された最も重要な問題は, 既知情報から未知情報を予測する手法の組織化である.

CAAD-I で用いた予測方法は, 材料を記述する変数(構成元素, 成分比, 結晶粒度, 他)の集合 M と材料環境を記述する集合 C との空間 $M \times C$ を, データ・ベース中に蓄積された 2 元系平衡状態図をもとに, 完備だと思われる部分空間に分割して, 各種特性値の補間および外挿による近似を行なうことと, 合金化に関して経験的に得られている半定性的な開発手法(銅にベリリウムを 0.5~4.0 at% 加えると時効硬化をおこす等々)を組合せ, データ・ベース中の各種特性値を参照しながら定量的な推算を行なうことであった. この予測方法に, 経験式あるいは理論式の適用による予測機能を付与すれば, データ・ベースの拡充に伴い, 金属材料研究者の常識的な予測の程度の予測を計算機にやらせることは可能である. この段階までは, いわゆる形式論理学で定式化されているような古典的な形での推論方法によりすでにコード化された.

しかしながら一般的に行なわれている材料開発は, 必ずしもこのように画一化された推論方法にのみ依拠したものではない. 例えば原子炉用のジルカロイ-2 の開発例がこのことをよく示している⁽³⁶⁾. この場合の開発の歴史は, 以下に示すように要約される.

(a) 最初の材料選択の段階では, 軽水炉用燃料被覆管材の候補として, ステンレス鋼, ニオブ, アルミニウム, ベリリウム, ジルコニウム等が考えられ, これらの材料に関する研究は並行して進められた.

(b) ジルコニウムの高温の水や蒸気に対する耐食性に関してはあまり展望がひらけていなかった.

(c) ジルコニウム選択の理由は, 熱中性子吸収断面積が小さいこと, 迂り面が多く, また双晶変形もおこしやすいので成形加工性はそれほど悪くないと考えられたこと, 酸素, 窒素等の不純物に対する溶解度が高いこと, 熱膨張率が小さいこと等である.

(d) 稠密六方晶であるための異方性は, 1つの欠点とみなされていた.

このようにして選ばれたジルコニウムをベースにしたジルカロイの開発は, 耐食性の改良を中心とし, 添加合

金元素をいろいろ変えた研究が進められた。この内錫、タンタル、ニオブの添加量は、実験事実に基づいた連続的な推論によって決定されたが、鉄、クロム、ニッケルの添加量は“偶然”あるいは“カン”による論理の飛躍によって決定された。この場合の“偶然”は、ジルカロイ-1のインゴットを溶解するときに、ステンレス鋼の小片を配合したところ、たまたま腐食に強いジルカロイ-2が開発されたのである。“カン”は、一般的にそれが好結果をもたらしたときに、後からその理由付けがされるもので必ずしも決定論的なものではない。この場合には、「ステンレス鋼の耐食性がすぐれているから、これを添加したらジルコニウムの耐食性にも好結果を生むだろう」という普通の金属学の考え方とは飛躍のある考え方がなされた。これはむしろまぐれ当りに近い例といえよう。一般にはもう少し金属工学の常識にそった“類推”という論理の飛躍がなされて成功した例が多い。それは従来“経験者のカン”として説明されてきたが、ここではそのひきおこされる過程を以下の5つの要因で考える。

(a) データの選択基準によるもの。例えばチタンで有効なものをジルコニウムに使ってみる選択。

(b) 適切な近似方法の選択の際に生ずるもの。例えば「ある応力、温度、結晶粒度のもとでは、Coble クリーブが主であるから、A式が最適である」といった選択。

(c) そのときまでに得られている近似方法よりもずっとよくある領域のデータを近似できるような新しい近似式あるいは近似方法に、突然思い当たる場合。

(d) 新しいデータの追加により、そのときまでに得られている近似方法が役にたたなくなる場合。

(e) あるステップまでの近似式の変化から、その近似式の究極的な形を推測した場合。

最初の2つの要因は、CAAD-Iで開発された方法——すなわち思考手順をトポロジカルな概念でとらえ、それを有向グラフ⁽²⁹⁾で表現して、見落しの少ない標準的な手順を自己組織化する方法——である程度克服できる。CAAD-Iでは、この有向グラフの節点に、考慮すべき特性値を対応させ、対象となる材料の量の変化を枝に対応させた。目標材料を選択する最適なプロセスは、最も少ない手順でしかも見落としがないものであり、このプロセスは考慮すべき情報を接続したハミルトン・グラフであらわされる。CAAD-Iで得られた一般の手順は、構造鈍感な特性から構造敏感な特性へ考慮の対象を移していくことによって、熱処理、加工等による改良の可能性を見落さないようにすることである。(c)、(d)、(e)の要因は、いわゆるモデルの形成の問題で、ADAM & EVEでは、近似式についてもデータ・ベース化をはかり、この種の論理の飛躍に対処することにする。

(3) ADAM & EVE の設計仕様

(a) 目標：各種特性値の推算機能の拡充を計る。

(b) 装置：大型計算機、TSS、グラフィック・ディスプレイ、ディスク、磁気テープ。

(c) 推算方法：CAAD-Iで開発された機能に、理論式および経験式を組織化した推算機能を加える。ただしこの組織化に際しては、前述の5つのタイプの論理の飛躍要因を組み込む。

ここで理論式および経験式の集合を Ψ とし、その要素を $\Phi_i (i=1, 2, \dots, n_p)$ としよう。 Φ_i は一般的に特性 i に関する材料の記述 $m \times c (m \in M, c \in C)$ から特性値 $v \in V$ への写像であり、その写像に関する解析的表現と適用範囲に関する定義を情報として持たなければならない。そこで Φ_i を式(1)で表わすことにする。

$$\Phi_i = \Phi_i(V_{It}, V_{Dt}, R_j, P_j, f_j) \quad (1)$$

ただし V_{It} は、 $m \times c$ についての変数の組で、関数 $f_j: V_{It} \rightarrow V_{Dt} (V_{It} \in R_j)$ の独立変数であり、 V_{Dt} は特性値、 R_j は関数 f_j の適用範囲に関する $M \times C$ 空間内での数値的表現であり、 P_j は R_j のパターン表現である。また関数 f_j を導くための基礎データは領域 R_j あるいはパターン表現 P_j の決めるデータの部分集合である。

特性 i に関して既知の関数 $f_j (j=1, 2, \dots, n_p)$ によって、 $M \times C$ 全域にわたって推算可能なことは稀であるので一般に

$$M \times C \supset R = \bigcup_j R_j \quad (2)$$

$$R \supset M \times C \quad (3)$$

であり、 $R = M \times C$ のときは、全領域の推算が特性 i に関して可能である。

このように写像 Φ_i を定義すると、そのデータ・ベース化は容易であるが、つぎの2つの問題点が未解決のまま残されることになる。1つはこれらの写像間の論理的関係が直接的な形で表現されていないことである。この問題については、Robinson⁽³⁷⁾の“問題を逆向きに解き、公理に達すれば証明は完了する方法”(Resolution Principle)の適用によりある程度解決される。もちろんこの場合には、公理の代りに「別の写像に到達すれば」と条件を書き換える。このようにして関係づけられた Ψ を、推算に適用することは、その自動化とともに要因(a)を克服する上でも非常に有効である。つぎの問題点は、1つの特性値に関して、2つ以上の互いに独立した推算方法が存在する場合である。この場合には、扱う対象が本質的に統計的現象であるか、または観測可能性の問題から $M \times C$ の記述が十分でないにもかかわらず写像を定義したことが原因と考えられる。そこでこの問題点に対して2つの方策を考える。まず第1に M の記述を演繹的な推算が十分可能なものにするために、定量金属組織学的アプローチをする機能をシステムに取り入れ

る⁽¹⁵⁾⁽¹⁶⁾。つぎにそれぞれの独立した推算方法を、統計的現象としてとらえ、それぞれの推算方法によって得られた値に重みをつけることによって、1つの推算値を計算する。重みのつけ方は、ある推算方法を導くための基礎になった情報量と、 Ψ の中でのその推算方法と関係づけられる ϕ_i の数を変数とした学習を行なうための関数を導入する方法にする。情報量は、 $M \times C$ に関する記述とデータの数とし、関係づけられる ϕ_i の数は、 ϕ_i を含む部分グラフの節点の数とする。

以上の準備を基にしてつぎに示す方法によってシステムを伶俐にしていく。

(i) データ・ベース中の材料の記述の集合と特性値の集合に、 Ψ を適用することによって領域Rの拡充をはかる。

(ii) 状態図、結晶構造等のパターンの表現である P_j と f_j との因果関係を相似法、両断法、剰余法等の一般的方法により確立する。

(iii) データ・ベースの拡充は、新しいデータを手に入れるたびに行なう。

(iv) 各種特性値間あるいは部分空間 R_j 間での特性値の相関係数を変数とした距離——例えばマハラノビスの汎距離⁽²⁸⁾——を計算することにより、統計的裏付けを持った f_j の選択あるいは類推方法の決定を、学習による重み付けと並行して行なう。

(v) 特定の情報を選択し設計に適用するために、クラスター分析⁽²⁸⁾の分離条件の算出を行なう。

結局本システムの基本的論理は、システムの成長の可能性を保持しながら予測可能な部分空間を構成し、それらをグラフによってトポロジカルに結びつけ、射影子によって統計的概念を得ることである。

4. 結 言

もとより金属材料設計に関するこのような視野の拡大は、多数の人々の参加する長年月にわたる共同的な討論の結果としてのみ漸次発展させられうるものであろう。本研究展望は金属材料設計の推論の仕方を中心に扱った研究の進行報告であり、もし本展望によってこの分野での討論の発展が促進されるならばその目的は達せられたことになる。われわれの試みに対する読者のご理解とご支援をねがってやまない。

文 献

- (1) 長野晃三: J. Mol. Biol., **75** (1973), 401.
- (2) B.G. Buchanan: *Proc. 2nd UJCC*, Japan Convention Services, Inc., (1975), 189.
- (3) N.S. Sridharan: *Proc. Information Processing*, **74**, North Holland, (1974), 828.
- (4) E.J. Corey and W.T. Wipke: *Science*, **166** (3902), (1969), 178.
- (5) 米田信夫: 東京大学大型計算機センター, センターニュース, **7**, 3, (1975), 3.
- (6) D.H. Breen and G.H. Walter: *Metal Progress*, **102** (1972), 42.
- (7) 渡辺力蔵, 九重常男: 鉄と鋼, **61** (1975), 126.
- (8) Y. Mishima, S. Ishino and S. Iwata: *Materials Sci. & Eng'g*, **11** (1973), 163.
- (9) S. Iwata, S. Ishino and Y. Mishima: *Proc. 2nd UJCC*, Japan Convention Services, Inc., (1975), 69.
- (10) S. Iwata, S. Ishino and Y. Mishima: *Proc. IFIP 2nd W.C.*, Computers in Education, North-Holland, (1975), 919.
- (11) S. Iwata, S. Ishino and Y. Mishima: *Proc. 4th IJCAI*, The Artificial Intelligence Laboratory, Publications, Department, Cambridge, Mass., U.S.A., (1975), 782.
- (12) 三島良績, 岩田修一: 情報管理, **18** (1975), 306.
- (13) 岩田修一, 石野 栞, 三島良績: 情報処理学会第14回予稿集, (1973), 469; 15回大会予稿集, (1974), 227.
- (14) 岩田修一, 石野 栞, 三島良績: 金属学会講演概要集, (1975-10), 322.
- (15) 三島良績他: 金属学会, 定量金属組織学に関するシンポジウム, (1973).
- (16) 三島良績他: 日本原子力学会, 昭和49年秋の分科会予稿集(I), (1974), 46.
- (17) V.F. Zackay, et al.: *Materials Sci. & Eng'g*, **16** (1974), 201.
- (18) T.W. Olle: *Proc. 1972 CERN Computing and Data Processing School*, European Organization for Nuclear Research, (1972), 443.
- (19) CODASYL Systems Committee: *Feature Analysis of Generalized Data Base Management Systems*, ACM, (1971).
- (20) P. Lindgreen: *EDDAP-notes*, No.11, June, (1974), PL/MEB, 1.
- (21) 情報処理学会: データ・ベース研究会資料, 1 (1973)~25 (1975).
- (22) 情報処理学会: マン・マシン・システム研究会資料, 1 (1973)~22 (1975).
- (23) I.C. Braid: *CACM*, **18** (1975), 209.
- (24) I.C. Braid and C.A. Lang: *Automatica*, **10** (1974), 635.
- (25) K.L. Walters and R.E. Alcouffe: *LA-5138*, UC-32, Feb., (1973).
- (26) K.D. Olshausen and J.K. Larsen: *J. Testing and Evaluation*, **3**, 2 (1975).
- (27) 穂坂 衛: コンピュータ・グラフィックス, 産業図書, (1974).
- (28) 竹内 啓, 柳井晴夫: 多変量解析の基礎, 東洋経済新報社, (1972).
- (29) F. Harary, 池田貞雄訳: グラフ理論, 共立出版, (1972).
- (30) С.М. Ямпольский, Ф.М. Хилук, В.А. Лисичкин, 宮川 淡訳: 技術予測の諸問題, アグネ, (1971).
- (31) 柿内賢信他: 数理科学, **10**, 3, (1972), 5.
- (32) 高木純一他: 数理科学, **10**, 11, (1972), 5.
- (33) S. Watanabe: *Knowing and Guessing*, John Wiley & Sons, (1969).
- (34) A. Bork: *Proc. 2nd IFIP*, Computers in Education, (1975), 17.
- (35) D.E. Knuth: *The Art. of Computer Programming*, Vol.1, Addison Wesley, (1973), 1.
- (36) B. Lustman: Technical Development of Zirconium for Nuclear Reactor Use, 第1回クローラ賞受賞記念冊子, NR: D: 1975 (1975), 3月.
- (37) J.A. Robinson: *An Overview of Mechanical Theoretical Approaches to Non-Numeric Problem Solving*, Spring Verlag, (1970), 2.