

合金設計におけるモデリング

東大工 岩田修一 (Shuichi Iwata)

1. はじめに

合金設計は、合金の利用者から示された使用目的、必要な機能(特性、ふるまいの組み合わせ)に対し、製造可能な最適な合金を解として示す作業である。通常の機械設計におけるCADとの相違は、自然法則による制約を多く与えること、構造表現が近似的であること、さらには定性的な記述が多いこと、などである。つまり、情報が不完全なのである。

このため、合金設計においては、知識の獲得、問題解決方策の評価、選抜、個別的な知識の合成、推論のための入力となるデータの評価、選定などの複雑な処理が混在する。モデリングは、これらの総合化プロセスと考えることができるが、以下、そのシステム化を目的として、試論を展開した。用語については、定義をしてゆくための紙幅がないので、適宜例を示すことにし、できるだけあいまいさを減ずる努力を

する = とにする。

2. 合金データの特徴

本来、物性は、エネルギーおよび物質の移行を記述したものである。エネルギーに関して、我々が取り扱わなければならない範囲は、 $eV \sim MeV$ と拡大し、観測の可能性も $\sim fm$ まで微細になる。このように、手法の上から極めて広い範囲にあたる。時間的な因子は、 10^{13} 秒以下の時間内に生起する事過程もあり、長期にあたる使用する構造材料の場合には、そのような事過程が集積して、数十分の後に結果的に、安全かどうかの判断を求められることが多い。このような対象を表現する場合には、必然的に近似表現となることから、合金データの特徴は、以下のようになる。

(i) 断片的である。

(ii) データ表現に大きな質的差異がある。つまり、きめ細かな事象を詳細に高い精度で記述したものから、現象論的な記述まで、幅広いスペクトルを持つ。

(iii) 時間、エネルギー、手法のそれぞれの視軸において、データ表現は階層化されている。

(iv) 観測手の不完全なことに起因して、データ間の論理的な整合性がとれないこともある。

このようなことから、データの形式としては、以下のような特徴を持つことになる。

- (a) フラットファイルを作成しようとすると、空値だらけのファイルになる。
- (b) データの定義が標準化されていないため、一次情報を加工し、目的に合わせたファイルを作成するためには、一次情報の解釈と合目的的なデータ変換を必要とする。
- (c) 測定値は、誤差を伴うものであるため、上限、下限、区間、代表値、誤差、標準偏差などの組み合わせで表現されることが多い。
- (d) 数値化できない場合には、パターンで示されたり、文章で表現されたりするため、本来、同一の対象でも、様々の表現が混在する場合がある。
- (e) 数値には、単位がつく場合が多い。
- (f) ギリシャ文字、添字、特殊記号などが使用される。

データベース開発の立場から問題点としては、

- (1) 文献からデータベースを構築する場合には、データの重複が、一次ファイルの段階で避けられていない。論理的に4エッジする方法がないだろうか。
- (2) 実験を完全な形で記述するのに、情報が不足している場合、どのようにしてこれを補完するか。

なてがある。

材料データベースとしては、QBE, INGRES, ADABAS, ORION, IDMS, PLANNER などによつて、パイロットシステムを構築したが、ここでは QBE 上で実現したデータベースのデータ構造を示す。フラットファイルにすると、数千フィールドになるような対象であるが、ここでは、AVAILABLE DATA ファイルに、変数名と組で、つめ込んでいす。下限、上限、代表値などのフィールド分けや、単位なしなどの制約はあるが、第 1 ステップとしては、ほぼ十分な機能を有していす。

データベースの開発プロセスとしては、ソースデータファイル(種々のデータモデルが混在したもの)、マスターファイル(ひとつのデータモデルに統一したもの)、標準データファイル(マスターファイルに統計処理を行つて、整理したもの)、小まじデータファイル(実験データ + 解析コード)の4つのレベルを考えこいす。図で示したデータ構造は、ソースデータファイルとマスターデータファイルの中間に当たるものであるが、以下、どのようにして、マスターファイルも構築するか、小まじデータファイルにおいこ、どのようなモデル構築が考えられるかについこ、考察することにする。

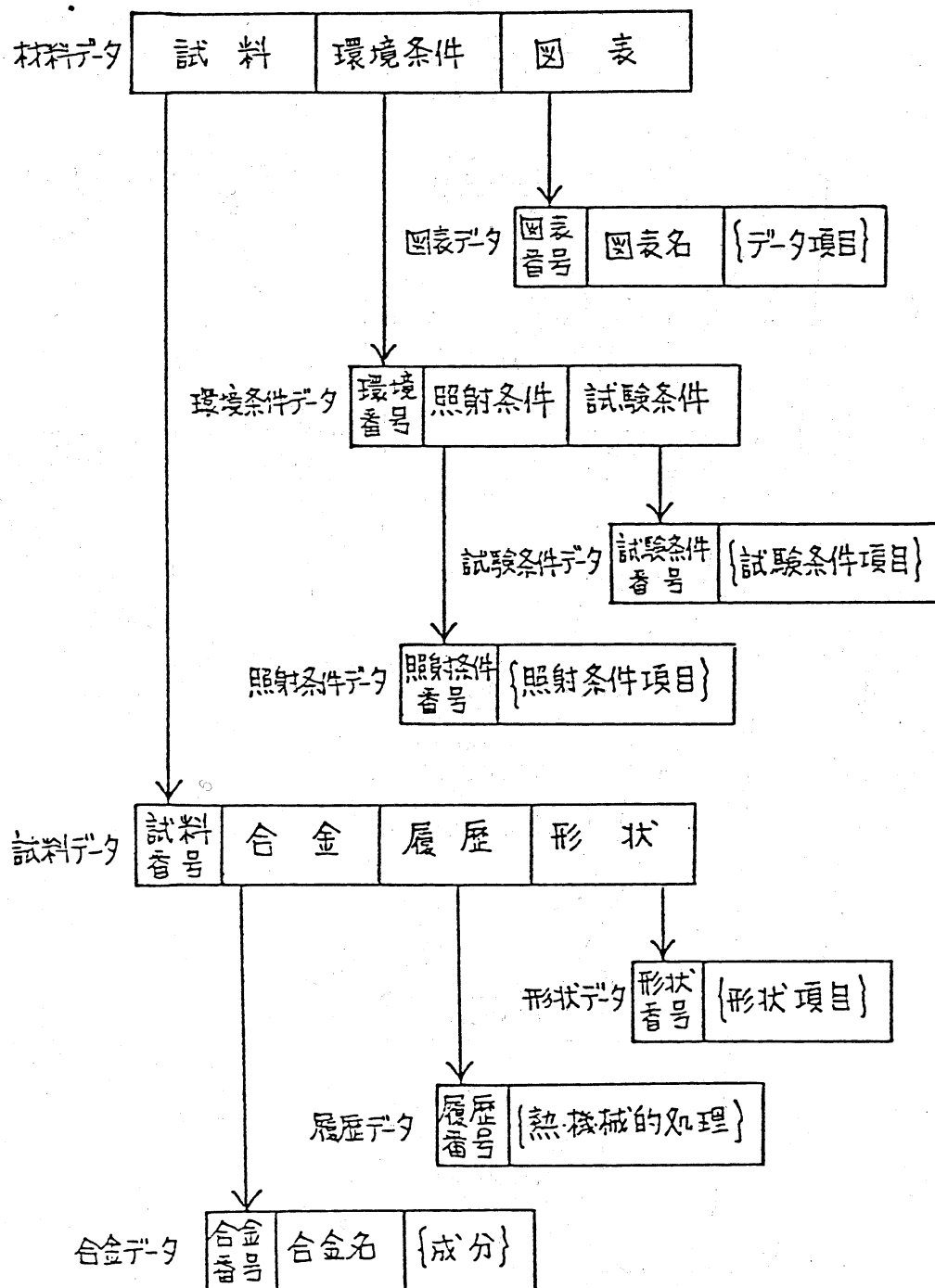


図 1. 材料データの構成

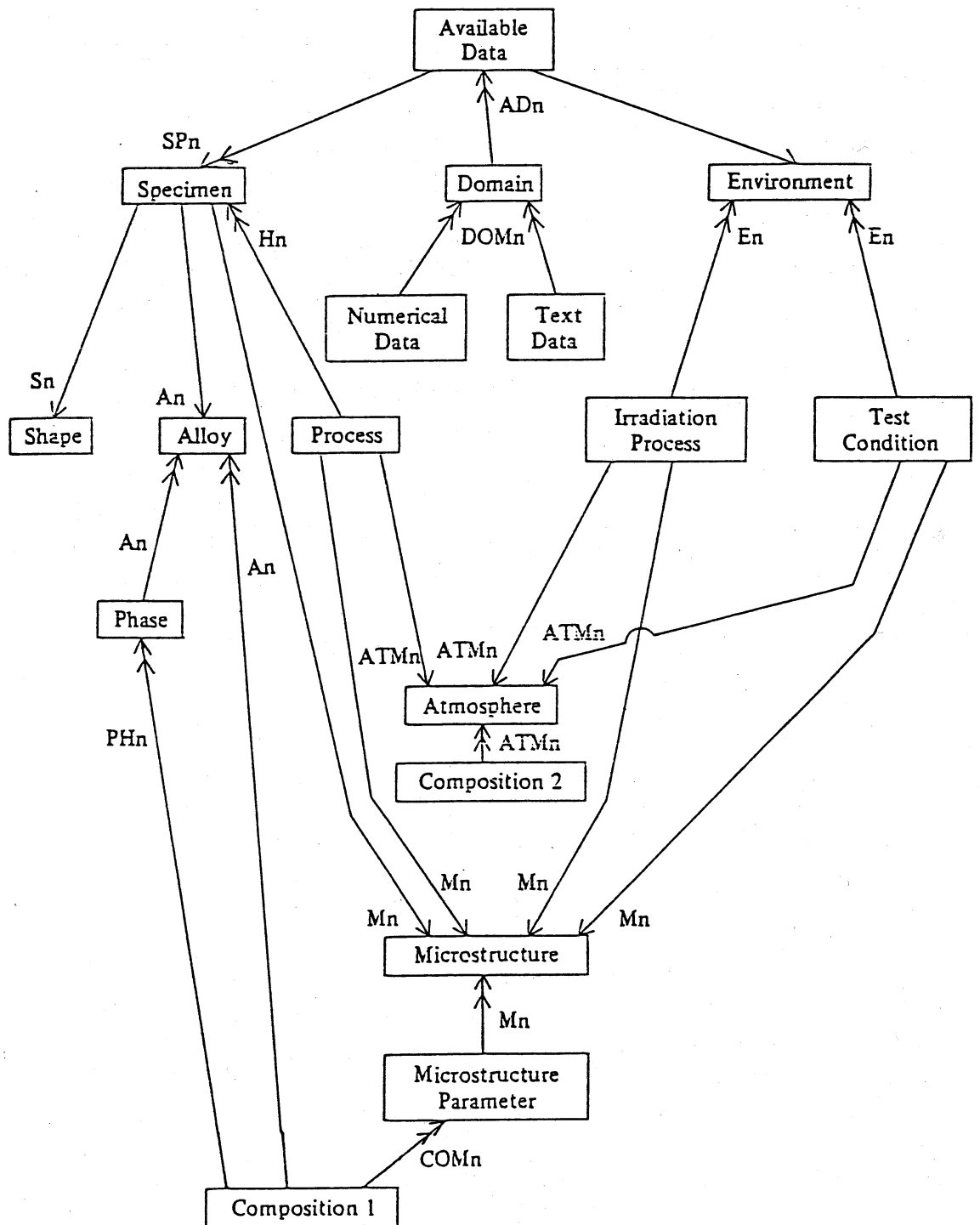


図2. 関係データベース管理システムでのデータ構造の概念図

SPECIMEN	ID	HN	HISTORY NAME	MAX.SEQ.NO.	PN AT THE MAX.SEQ.NO.	AN	SN
	18	18	A64	12	18	18	18

PROCESS	ID	HN	SEQ.NO.	TYPE	ATPN	*P1	*P2	*P3	*P4	*P5
	18	18	12	A8	18	3E12.5	3E12.5	3E12.5	3E12.5	3E12.5

SHAPE	ID	SN	SHAPE NAME	*THICKNESS	*WIDTH	*LENGTH	*DIAMETER	STANDARD NO.
	18	18	A16	3E12.5	3E12.5	3E12.5	3E12.5	A16

ALLOY	ID	COMN(AN)	NAME	COMMENT(CAD)	NUMBER OF PHASE
	18	18	A32	A32	12

PHASE	ID	COMN(AN)	COMN*(PHN)	PHASE NAME	*PHASE COMPOSITION	UNIT
	18	18	18	A32	3F8	A8

MICROSTRUCTURE	ID	PN	MICROSTRUCTURE NAME	NUMBER OF MICROSTRUCTURE PARAMETER
	18	18	A32	12

MICROSTRUCTURE PARAMETER	ID	PN	MICROSTRUCTURE PARAMETER NAME	COMN	UNIT	*VALUE	COMMENT
	18	18	A32	18	A8	3E12.5	A64

ATMOSPHERE	ID	NUMBER OF ELEMENT	COMN(ATPN)	NAME
	18	12	18	A32

COMPOSITION 1	ID	INN	COMN	UNIT	*H	*He	*La	*Kd
	18	A2	18	A8	3F8	3F8	3F8	3F8

COMPOSITION 2	ID	ATPN	NAME	*COMPOSITION	UNIT
	18	18	A32	3F8	A8

図3. (a) 図2に示したデータ構造のレコード型

SPECIMENは、試験片の構造を示すレコードで、PROCESS (処理)、SHAPE (外部的形状)、ALLOY (合金分類)、PHASE (相)、MICROSTRUCTURE (ミクロ組織)、COMPOSITION (成分) などと関係づけられている。

AVAILABLE DATA	ID	ADn	TABLE NAME	NUMBER OF DOMAIN	NUMBER OF DATA	IN	EN	COMMENT
	18	18	A32	12	14	18	18	A64

DOMAIN	ID	ADn	DOMn	DOMAIN NAME	DATA TYPE	UNIT
	18	18	12	A32	A2	A16

NUMERICAL DATA	ID	ADn	DOMn	VALUE
	18	18	12	E12.5

TEXT DATA	ID	ADn	DOMn	COMMENT
	18	18	12	A64

ENVIRONMENT	ID	EN	ENVIRONMENT NAME	NUMBER OF IRRADIATION PROCESS	NUMBER OF "IRRADIATION PROCESS" RECORD	NUMBER OF TEST CONDITION	NUMBER OF "TEST CONDITION" RECORD
	18	18	A32	12	13	12	13

IRRADIATION PROCESS	ID	EN	CONDITION NO.	TYPE	PARTICLE	INSTRUMENT	ATPn
	18	18	12	A8	A3	A16	18

P1 PARAMn	P2 PARAMn	P3 PARAMn	P4 PARAMn	P5 PARAMn	PN	COMMENT
16	16	16	16	16	18	A64

TEST CONDITION	ID	EN	CONDITION NO.	TYPE NAME	PARAMn	PN	ATPn	COMMENT
	18	18	12	A32	16	18	18	A64

PARAMETER VALUE	PARAMn	UNIT	MIN	MAX
	16	A16	E12.5	E12.5

図3.(b) 図2に示したデータ構造のレコード型

ENVIRONMENT, IRRADIATION PROCESS, TEST CONDITION などのレコードは、構造変化の原因となるもので、SPECIMEN レコードとの直積が各種数値データ、文字列データ (AVAILABLE DATA, DOMAIN, NUMERICAL DATA, TEXT DATA) に、1対1対応するように設計した。

3. 合金設計のための Tactics

"Nature designs everything from atoms." (von Hippel, Science, 12 Oct., (1962) 91) という観点から、演繹的な手法の積み重ねで合金設計を考えることもできる。つまり、原子間ポテンシャルなどを活用して、仮想的に物質を合成し、示すべき特性を予測して、満足できる特性の組み合わせを持つ可能性のある物質合成法を探求するということやり方であるが、計算時間の点ですべての合金系にこの方法を適用することは現実的でない。また精度の高い予測は、単純な系に限られる。

現実的には、精粗さまちまちなレベルで記述されているデータおよびモデルを効率的に組み合わせ、目標に接近するという方策が、合金設計例の大半を占めている。そこで設計プロセスの導過程を、この現実的な立場から整理してみると、以下のようなになる。

(i) 基本的な特性相関の導出

価電子数/原子, 価電子数/体積, 電気陰性度, 原子半径, 融点, 格子定数などの相関によって整理できる特性も少なくない。個々の元素の原子としての特性が、ほぼそのままの尺度で、全体の特性に反映されるようなケースで、射影によって対話的に導出できる例である。Hume-Rothery 則, Matthias 則, Dulong-Petit の法則など、人

ものついたものに多い。耐食性は実験してみなければわからない、というのが通説であるが、酸化の防止に関する Pilling-Bedworth 則, Hauffe's valency rule など、直感的に導出できるものが多い。

④) "シミュレーション" の適用

①) で述べた法則は、射影操作を主としてデータベースより導出できるが、強度、耐食性といった重要な特性は、与えた場に対する構造変化を推定し、結果的に与えた構造の属性とく、特性が定義される。したがって、ここでは、"シミュレーション" が不可欠である。

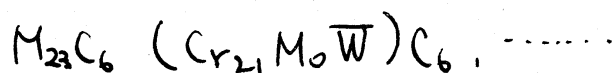
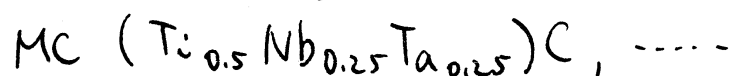
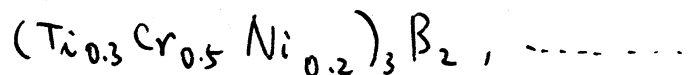
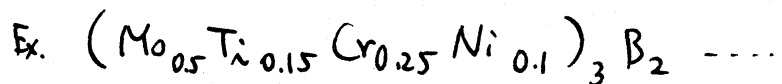
シミュレーションでは、作業仮説として、"ある構造" を設定し、場を与えて、構造変化を求め、特性を予測する。

例 1. PHACOMP 法

① 作業仮説としてある成分比をもつ合金を考える。

② 構成元素の大まかな配置を定める。

—— 部品の構成を定める



— 不用な部品を除く。

$$\begin{aligned} \text{Ex. } \left(\begin{aligned} \bar{N}_V &= 0.61 N_i + 1.71 C_o + 4.66 (C_r + M_o + W) \\ N_{V, \text{mit}} &\leq 2.40 \\ \bar{N}_V^b &= \sum_i (N_V)_i \cdot f_i^b \\ N_V^c &= \sum_i (N_V^c)_i \cdot f_i^a \\ N_V^c - \bar{N}_V &\geq 0 \end{aligned} \right. \end{aligned}$$

Md 法

- ③ ①で示した合金のうち, ②の条件を満足するものについて, 構造-特性相関の視点から評価を加える。
- ④ 実験により検証する。
- ⑤ 結果を評価し, ②, ③へフィードバックする。

例 2. 触媒設計¹⁾ (フィードバック過程省略)

① 目的反応の設定

熱力学的考察

経済性評価

目標値設定 (空時収率, 反応条件, 選択性, 寿命等)

② 仮りの反応機構

部分反応への分解 (好ましい反応, 好ましくない反応)

熱力学的・速度論的考察

③ 部分反応について 2 の基本触媒成分の選択

触媒特性 - 物性・組成に関する経験則あるいは

量子化学などによる活性・選択性予測

基本特性の把握 - 主成分, 第 2 成分, 担体の選択

④ 全反応の構成

基本成分の探索・試験

工業触媒としての評価 (寿命, 強度など)

⑤ 触媒試作・試験

触媒基本成分の最適化

反応条件の最適化

触媒調製法の選択・改良

寿命予測

⑥ プロセスの組立て

反応形式, 操作条件の最適化

例 3. 高温強度

① 強化方策の検索

固溶体硬化, 析出硬化, 分散硬化, 照射硬化,

加工硬化, - - - -

② 高温による構造変化の予測

回復, 再結晶, 時効析出, - - - -

③有効な強化法の選定

固溶体効果, $L1_2$ 型構造の特性の活用, ----

④一例1と同様の方策を適用

例1では、構成元素の分配が行われているが、これはある種の“シミュレーション”である。合金設計においては、初期条件として組成比を与えたとき、どのような合金ができるかを予測することが必要である。その予測手法は一般に、構造の変化を時間軸に沿って述べるタイプのもので、多くの場合は半定量的である。例2は、“分析”と“合成”が交錯している典型的な例で、合金設計プロセスにおいても、同様のものが多い。解が未知である場合には、発想、帰納、演繹のすべての推論を活用して、少しでも“正解”に近い“解”を得ることが求められる。定式化は容易ではない。例3は、比較的、解が限定されている、理解しやすい課題であるが、一方向凝固材料、単結晶、セラミックスなど、新たな材料に関しては、再度、基礎に戻って、検討をする必要がある。

4. 材料設計におけるモデリング

モデリングの具体的な内容については、材料の種類によっ

で、大きく異なるが、方法論については同様と考えるので、ここでは広く材料全般についてのモデリング手法を議論するにとする。

(i) 原料の組み合わせ方（組成比、配合の順序）からミクロ組成・ミクロ組織の決定まで

- ・原理的には、熱力学的/速度論的モデルが適用される。
- ・一般的なデータベースとしては、平衡状態図、CCT曲線、TTT曲線などがあり、その読み方を知識として与え、ミクロ組織/組成を予測させることは可能である。

- ・状態図の予測手法としては、数多くの近似法がある。

理想溶体近似 — 線型モデル（ ~ 0 次元）

正則溶体近似 — 相互作用パラメータの導入

（結晶構造、組成依存性も考慮するにとによる

こと、予測精度を向上させる。 ~ 3 次元）

クラスタ - 変分法 - 3次元的なモデル

- ・イオン結合、共有結合が、ギャングルの的構像をもつのに対して、金属結合はパナロケ的である。
- ・プロセス技術は、主として多様であり、また詳細については未知の部分が多い。このため、モデルはデータ

ベースを補完するものとして、位置づけされる。

(ii) 構造(ミクロ組織/組織)の表現

- 構造の完全な記述は不可能なことが多い。そのため、それぞれの目的に対応して、必要な述語が決まり、データモデルが次に決定され、構造変化に関するシミュレーションが行われて、特性との相関がとられる。
- 構造に関する述語の例を、以下に示す。
 - 核レベル……同位体比
 - 電子レベル……フェルミ面, 荷電子数, 電気陰性度, …
 - 原子レベル……原子半径, イオン半径, ……
空格子点密度, 合金組成, ……
 - 1次元……転位構造, 密度
 - 2次元……結晶粒界構造, 積層欠陥エネルギー,
双晶密度, 表面構造, 異相界面の構造,
逆位相境界, 磁壁などの構造
 - 3次元……析出物の密度, 形態
ボイド密度, 寸法, バブル……
 - 高次構造……集合組織, 各構成要素の配置, 配向,
結晶構造, 近り帯の構造, 偏析, ……
- 数値, パターン表現などが混在した極めて扱いにくい情報となっている。構造に関する記述があまりないでな

く存ったときに，ひとつの解がえられたことになる。

(iii) 構造-特性相関

- ・試験片の試験前の構造は，試験後には別の構造に変化していることが多い。構造変化をひき起こす場の名称が，特性名となり，場に対する応答がデータとなる。このような場合のデータの記述は，本来，動的なモデルとして表現すべきものであるが，一般には，ある時間的・空間的断面での情報を数値化することになる。データベースは，そのようなデータの集積したものと考えることが重要で，モデルとのインターフェイスは不可欠である。
- ・形式的には，データ，式，シミュレーションモデル相互の整合性がとれていることが，必要である。
- ・多変量解析を適用した実験データの整理は，主として鉄鋼材料のような実験データの豊富な系において，実用的レベルまで達している。
- ・構造を寸法の小さなものから大きなものに順次，表現している場合，メカニズムについても，同様の順序関係が存在しなければならない。
- ・現実的な立場からの抽象化・単純化は，しばしば行われる。第一次の予測としては，そのようにしたほう

が本質を見失うことなく、適用範囲も広い。精度の向上は、データベースの支援を必要とするが、理論的アプローチによる第一次の予測結果を補正するような方式で活用するのが妥当であろう。

Ex. 材料の強度

$$\text{降伏強度 } \sigma_y = \sigma_0 + k_y d^{-1/2} \quad (\text{ホールの式})$$

d : 結晶粒径

k_y : 係数

σ_0 はさらに分解すると、

$$\sigma_0 = \sigma'_0 + k_y' \cdot d_{SG}^{-m} + K_A f_A$$

d_{SG} : 亜結晶粒径

K_A, k_y' : 係数

f_A : 第2相の分率

σ'_0 に寄与する項とすれば、

$$\sigma'_0 = \sigma_0 + \Delta\sigma_{ss} + \Delta\sigma_p + \Delta\sigma_d$$

$$\sigma_0 = \frac{2\pi}{(1-\nu)} \cdot \exp(-4\pi\gamma/b) = \dots$$

$$\Delta\sigma_{ss} = G \epsilon_s^{3/2} C^{1/2} / 700$$

$$\Delta\sigma_p = \mu b / \lambda$$

$$\Delta \sigma_d = G n b / (2\pi (Ll)^{1/2})$$

などがある。一般に、 Σ で例示されたような理論式、実験式の個々の係数を求めるためには、膨大な量の精度の高い実験を必要とすることが多い。 Σ のため、実用上は、内・外挿可能な範囲のデータのサブ・セットを作り、 Σ で多変量解析などを実行して、現象論的な予測式を作ることも多い。現象論的な予測式の欠点としては、適用範囲を誤ると、大きく予測が外れる可能性のあることである。

(iv) 材料のふるまい

・材料のふるまいは、実機の使用条件にあわせるモデルである。FEM解析に代表されるような構造解析の問題や、耐食性、耐環境性の評価、照射損傷の解析など実験室レベルの特性データ、少数の実機試験データとモデルとの統合して、材料ふるまいを予測することはよく行われる。全体のシステム化については、最終的な形としては、高度に組織化されたCAD/CAMのようなものが考えられよう。つまり、単に図形を描くツールとしてのCADでなく、出力としての製品にエ学

な裏付けのある“設計”である。

以上、4つの項目についてこのモデリングについて概観したが、構造表現と構造変換が共通した重要な因子となっこのことがわかる。

5. システム化への方策

一般の材料研究者が利用できるようなソフトウェアで、前述した種々の機能を支援してくるものはない。情報処理技術の進展を待ちながら、材料に関する知見を整理しこくことにし、今後の方策を考えてみる。

(i) ソースデータファイルからマスターファイルへの変換方法の組織化、フィールド名に関するデータ(メタデータ)の編集・管理、構造に基づく階層化、近似レベルに基づく階層化など

(ii) マスターファイルの構築

(iii) 製造要因 $\leftrightarrow$ 構造 $\leftrightarrow$ 特性 $\leftrightarrow$ ふるまいのそれぞれについてこの相関関係の導出

(iv) 予測精度の向上という観点からのデータおよびモデルの利用方法の最適化

(v) 新規データおよびモデル追加時における自己組織化方策の検討

6. おわりに

サイエンスとテクノロジーとの分極化は今に止まった問題ではない。前者が多分に分析的であるのに対し、後者が合成的であることに帰着されるが、モデリングは両者を結びつけるものとして位置づけられる。ここで述べた内容は、材料を例にとった特殊なものであるが、CADにおける問題さほとんども含んでいえる点で、情報処理の観点からは一般的であると考えている。より包括的な視座からの御教示をいただいたければと考え、あえて研究報告の貴重なスペースをとっていただいた。

文 献

- 1) 文部省科研費費報告書 56850024 「材料設計システムに関する研究」 p.119