

金属材料設計のためのマン・マシン・システム-ADAM&EVE

岩田 修一, 石野 琢, 三島 良績
(東 大)

§ 1. まえがき

金属材料設計は、既知の金属関連情報の組織化とその情報の適切に利用との二つのプロセスからなる。過去に於ける金属材料設計のほとんどは、この既知および適切に対する判断が個別的レベルでなされたものであり、その設計手順の多くは intuition (論理的においまいな場合には inspiration) を重要な要素としを含ま。研究開発にとって intuition は本質的なものであるが、核融合炉用材料の開発の場合のような新しい未経験の需要に答えるためには、今までの伝統的な材料開発方法のみでは危険が多い。理由は、以下に示す二つに大別される。

i) 核融合炉の開発の場合のように、その計画が成功するかどうか未知数でしかも巨額の投資を必要とする問題に対しては、その問題点について恒常的に技術評価をする準備をしておかなければならぬ。核融合炉の場合の材料に関する評価には、おおよばにいて、三つの焦点がある。まず第一は、天然資源の問題である。炉壁材料として考えられているニオブ、バナジウム、モリブデン等の純粋量、資源の偏在に関しては、資源ナショナリズムの問題とともに、天然資源の有効利用に関して産業構造と代替的構造材料の視点からの検討が必要となる。このためには、各種合金の特性値の探索・推定機能を持ったシステムの開発が不可欠であると考えられる。¹⁾ 次は、想定されるような苛酷で複雑な使用条件に耐えられるような材料の開発が可能かどうかの問題である。最後は、安全性(あるいは、Public Bads の発生)に関する評価は、事後的であってはならぬことである。このことは、潜在的被害者である将来世代は、存在しないことに起因する。

ii) 材料開発は、使用条件との相対的な関係において議論されなければならない。ところが、この使用条件は核融合炉を作ることによってのみ実現されると考えられるため、情報不足は核融合炉用材料の開発・評価にとってその程度の差こそあるが不可避な問題である。従って、核融合炉用材料が既存の運用合金の改良合金として開発されるにせよ、あるいはまた、たとえばジルカロイの開発で示されたような新合金として実現されるにせよ、核融合炉用材料の総合的評価・開発は、その時点での既知情報を基盤にした情報構造に基づく推論に依拠したものに存せざるを得ない。これらのことを、効率的に実現するためには、炉設計側と材料側との円滑な情報交換機能とともに、基本的物性値から製造性まで多岐にわたる既知情報を把握、利用できる機能を持ったダイナミックなシステムが必要である。

以上のインセンティブから、金属材料設計のためのシステムの作成に着手した。1969~1970年には、実験的アプローチ、1970~1971年には、状態回情報処理、1971~金属材料組織学、1972~1975年は、CAAD-IC (Computer-Aided-Alloy-Designing-IC)、1976~ADAM & EVE (Alloy-Design by Automatic Modeling and Estimation of Values from Experimental data) の開発・研究を行って来た。ここでは、CAAD-ICの概略と現在開発中のADAM & EVEの目的、機能、問題点を中心に、金属材料情報の組織化について考察する。

§ 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。厳密な意味で前述の二つのプロセスを計算機システムとして実現するためには、大別して二つの問題点がある。

一つは、金属関連情報のなかには付号化、データ・ベース化に注意を要するものが多し。例えば、材料の記述には、FIM写真から成分比まで多様な方法があり、それらを合目的的に組織化するためには、推論方法に依った情報の構造化が必要である。又製造性のように数値的表現が難しいものに関しては、その標準化、規格化が必要である。これらのことは、既知の情報をデータ・ベースとして available にするのためのマン・パワーの観点から、現実的妥協点として、当面は決定されるべきであろう。

次の問題点は、最適な情報の選択に関連したものである。特性値の組織的な推算には、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は、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を選択することが必要である。もちろんこれらの選択条件は所与のものではないが、学習等の機能によりある程度のコード化をばかすことは、システムの効率を向上させるために必要であると思われる。

材料設計の一般的な手順は、図1に示されるようなものである。ここでP1~P6は以下の内容である。

- P1: Inputs of requirements by designating the ranges of required properties.
- P2: Retrieval of information of materials which satisfy the requirements.
- P3: Evaluation of selected materials.
- P4: Selection of a starting material by the evaluated results.
- P5: Improvements of the starting material so as to meet the requirements by applying the tactics which could be induced and/or deduced from the available information of the first category.
- P6: Evaluation of the improved materials.

P5における tactics は、ネットワークとして表現することが可能な過去における合金開発の経過を逆さまに解いて、各ブランチに定性的な理由づけを行なったものである。図2にネットワーク表現の例を、表1に tactics の例を示す。

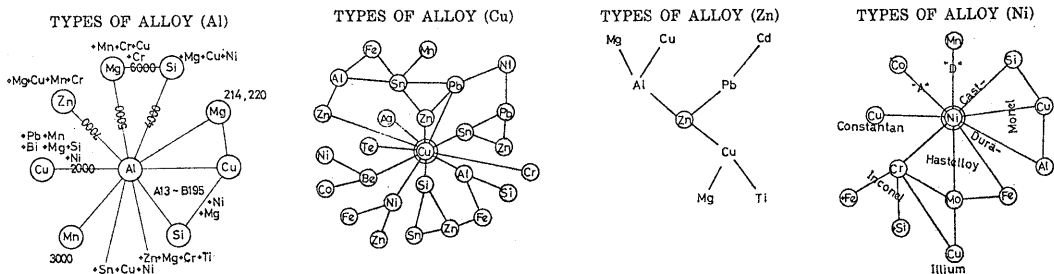


図2. 合金開発のネットワーク表現

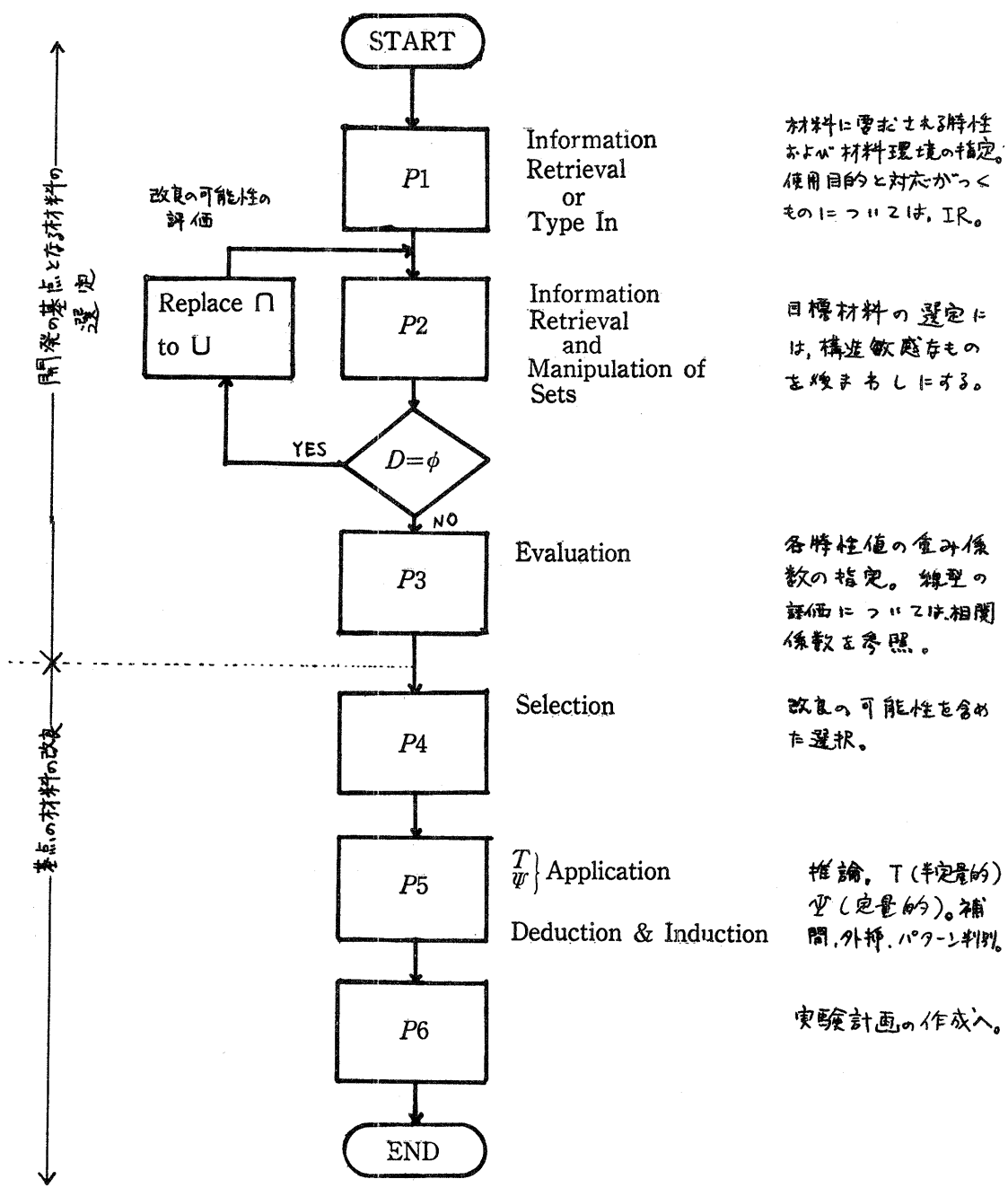


図 1. 金属材料設計の一般的手順

表 1. Tactics の例

MB	1000.0		A-OXIDATION,FORGABILITY	MAGNOX-CAST
BE	0.005	0.05	A-OXIDATION,FORGABILITY	FIRST MAGNOX
CA	0.0	1.1	HEAT RESISTANCE	HEAT RESISTING MAGNESIUM ALLOY
ZR	0.20	1.0	HEAT RESISTANCE	HEAT RESISTING MAGNESIUM ALLOY
LI	0.3	10.0	HEAT RESISTANCE	HEAT RESISTING MAGNESIUM ALLOY
R.E.	2.5	4.4	HEAT RESISTANCE	HEAT RESISTING MAGNESIUM ALLOY
TH	0.0	3.0	HEAT RESISTANCE	HEAT RESISTING MAGNESIUM ALLOY
ZN	1000.0			
BE	0.0	1.1	DUCTILITY	ZN-CU-BE(G.F.E.)
PB	1000.0			
AG	0.0	1.1	CORROSION RESISTANCE(PBSBATTERY)	
CA	0.0	1.1	AGING	BATTERY,BAHN METAL
BI	0.0	50.0	MELTING POINT DOWN	WOOD'S METAL
SI	0.0	1.0	HARDENING	BRAMCON
CD	0.0	10.0	MELTING POINT DOWN	WOOD'S METAL
BA	1.0	4.0	AGING	BAHN METAL
NI	1000.0			
B	0.01	1.5	HEAT RESISTANCE	HEAT RESISTING ALLOY
BE	0.0	3.0	AGING	PRECIPITATION H. SPRING METAL
HO	0.0	1.0	HEAT RESISTANCE	HEAT RESISTING ALLOY
NB	0.0	1.0	HEAT RESISTANCE	HEAT RESISTING ALLOY
TA	0.0	1.0	HEAT RESISTANCE	HEAT RESISTING ALLOY
ZR	0.0	30.0	CORROSION RESISTANCE	CHEMICAL ENGINEERING
CD	1000.0			
H	0.0	15.0	HEAT RESISTANCE	HEAT RESISTING COBALT ALLOY
B	0.02	0.4	HEAT RESISTANCE	HEAT RESISTING COBALT ALLOY
TI	0.0	4.0	HEAT RESISTANCE	HEAT RESISTING COBALT ALLOY
TA	1.5	4.0	HEAT RESISTANCE	HEAT RESISTING COBALT ALLOY
NB	1.0	4.0	HEAT RESISTANCE	HEAT RESISTING COBALT ALLOY
HO	4.0	10.0	HEAT RESISTANCE	HEAT RESISTING COBALT ALLOY
H	1000.0			
THDZ	2.0	40.0	FILAMENT	IORITAN
HF	200.0	20.0	A-GRAIN GROWTH	NOT USED
TI	1000.0			
V	0.0	4.0	STRENGTH	TI 6AL-4V

Tactics は, CAAD-I での, 形式
的は

$$T(a, b, c, d, e)$$

- a: ベースの金属
- b: 添加元素又は不純物
- c: b の下限
- d: b の上限
- e: b の効果

で表現する。左例では, a を
1000.0 で示してある。T の
適用は, 状態図情報を利用
したパターンマッチングに
より行なう。熱処理, 加工
に関連するものは, この範
圍では無い。

定量的推論に関しは, 経験
式および理論式を利用する
のが, 一般的であると考
えられる。ここで理論式お
よび経験式の集合を \mathcal{E} とし,
その要素を $\mathcal{E}_i (i=1, 2, \dots, m_p)$

としよう。 \mathcal{E}_i は一般的に特性 i に関する材料の記述 $m \times c$ ($m \in M$ (材料を記述する変数の集合), $c \in C$ (材料環境を記述する変数の集合)) から特性値 $v \in V \cap$ 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ぬ。 $\mathcal{E} = \mathcal{E}_i$ を式 (1) で表わすことにする。

$$\mathcal{E}_i = \mathcal{E}_i (V_{Li}, V_{Di}, R_j, P_j, f_j) \quad (1)$$

ただし V_{Li} は, $m \times c$ に 11 の変数の組で, 関数 $f_j: V_{Li} \rightarrow V_{Di} (V_{Li} \in R_j)$ の独立変数であり, V_{Di} 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 を著した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 の決めたデータの部分集合である。

特性 i に関し既知の関数 $f_j (j=1, 2, \dots, m_i)$ によつて, $M \times C$ 全域にわたる推算可能な \mathcal{E} は稀であるの一般に。

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

R ≠ M × C

(3)

であり, R = M × C のときは, 全領域の推算が特許心に関し可能である。

二のように経験式および理論式を連立化し等価式により, 情報構造に基いたとをその一意的な表現が可能である。又二の表現により, 情報間の論理的関係を構成する等価推論機能の理論的裏付けを, システムによつて与えられた等価式が可能となる。例えば, 図3に示した知識は, 以下の式の集合として表現できる。

- $V_{I \text{ creep rate}}$: T (temperature), σ (stress), d (grain size)
- $V_{D \text{ creep rate}}$: $\dot{\epsilon}_T$ (total strain rate), $\dot{\epsilon}_{\text{glide}}$ (creep rate due to dislocation glide), $\dot{\epsilon}_{\text{climb}}$ (creep rate due to dislocation climb), $\dot{\epsilon}$ (rate of Coble creep)
- R_j : α -Zr, Zircaloy-2
- P_j : sequential-dependent or series-sequential dependent mechanism

$$\dot{\epsilon}_T = \dot{\epsilon}_T = \text{MIN}(\dot{\epsilon}_{\text{glide}}, \dot{\epsilon}_{\text{climb}}) + \dot{\epsilon}$$

$$\dot{\epsilon}_{\text{glide}} = C \exp(\beta\sigma) \exp(-(Q_k + \eta/\sigma)/RT),$$

$$\dot{\epsilon}_{\text{climb}} = A \frac{D_1 b^3}{kT} \left(\frac{\sigma}{\mu}\right)^n,$$

$$D_1 = D_1^0 \exp(-Q_1/RT),$$

$$\dot{\epsilon} = 47.5 \frac{kT}{Q\sigma} \frac{1}{d^3} w D_{\text{ob}},$$

$$D_{\text{ob}} = D_{\text{ob}}^0 \exp(-Q_{\text{ob}}/RT),$$

Parameter	α -Zr	Zircaloy-2
C (sec ⁻¹)	2.5 × 10 ⁷	2.88 × 10 ⁴
β (dyn/cm ²) ⁻¹	1.7 × 10 ⁻⁶	1.20 × 10 ⁻⁸
Q_k (cal/mol)	50000	50000
η (cal·dyn/cm ²)	1.27 × 10 ¹²	1.27 × 10 ¹²
A	1.85 × 10 ⁻²	7.00 × 10 ⁹
D_1^0 (cm ² /sec)	5.9 × 10 ⁻²	12.6
Q_1 (cal/mol)	52000	64300
μ (dyn/cm ²)	3.4 × 10 ¹¹ - 2.36 × 10 ¹⁰ T (C)	
b (cm)	3.226 × 10 ⁻⁸	3.226 × 10 ⁻⁸
Ω (cm ³)	2.32 × 10 ⁻²³	2.32 × 10 ⁻²³
w (cm)	10 ⁻⁷	10 ⁻⁷
D_{ob}^0 (cm ² /sec)	0.75	17.5
Q_{ob} (cal/mol)	26700	42500
n	4.70	4.5

(Ref. Knorr, R.B. & Notis, M.R.:
"Reformation Mechanism Mapping of α -Zr
and Zircaloy-2, J. Nucl. Mat. 56, 18-24
(1975) を, 11式の定義に従って
書き直した。))

MACROSCOPIC ASPECTS

Here the creep phenomena is estimated and/or evaluated by macroscopic properties as easily stored and retrieved by DBMS.

MELTING POINT

A high melting point metal will tend to have a high creep resistance because the diffusion coefficient is a function of the homologous temperature (T/T_m).

SOLUBILITY

Solid-solution hardening is best obtained by a use of a solute having a valency and an atomic size markedly different from that of the parent metal. Unfortunately these factors tend to mitigate against extensive solid solubility. This factor could be also related to the use of precipitates so as to increase the creep resistance further.

MICROSCOPIC ASPECTS

Here the creep phenomena is estimated and/or evaluated by deductive or inductive inferences with considering dislocation dynamics, etc.

DIFFUSION

The rate of recovery and of dislocation glide (in cases where the latter is controlled by the non-conservative movement of screw-jogs), at a given temperature, be related to this factor.

STACKING FAULT ENERGY

The dislocations are dissociated and thus find it more difficult to cross-slip and to climb in order to avoid obstacles. High valency solutes tend to be the more efficacious as sources of enhanced flow-stress.

SIZE FACTOR, GEOMETRY

This factor could be associated with the strength of obstacles to dislocations. However we must consider also geometrical factors so as to estimate the creep strength. Theory indicates that there is an optimum spacing of the dispersion for the maximum strength. As for precipitation hardening, which is the extrapolation of this factor, the geometrical factors are of great importance, e.g., the spacing between the precipitate particles should be just small enough to prevent dislocations bowing around the particles. Unfortunately such dispersions are so fine that they tend to coarsen to reduce their surface energy during surdion at elevated temperatures. Not only does thermal diffusion tend to produce this effect, but there is evidence that the strain produced during creep can itself accelerate the coarsening process. In order to slow down dislocation creep specifically, so may be able to find a precipitate which actually forms (and remains) on the dislocation themselves.

BASIC SOURCES OF CREEP STRENGTH IN METALLIC ALLOYS

図3.7リー-70強度のメカニズム。
(Geometryに関する直接的表現は, 画像によつて示され存在が, R_j であり P_j を限定する等価式によつて, 間接的にその Geometry を表現する等価式が得られる。但し, 二の場合には, 論理的連続性は, 保証し存在しない。)

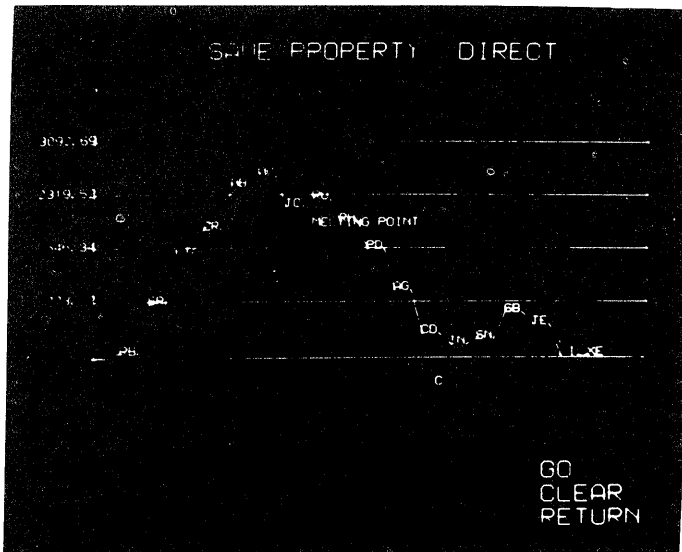
§3. CAAD-I 概略

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端末を利用したコシ・コソシの情報交換、状態図の基本的パーツの認識、多変量解析、合金化の効果の予測等である。蓄積した情報の種類、検索論理、検索効率を表2に、検索結果の一例を図4に示す。

表2. CAAD-Iのデータの種類の種類、検索論理および検索効率

データの種類の種類	データ構造	写 像	効率	容量	註
基本的物性値	配 列	$F_p: E^{10^4} \rightarrow V_p^{10^4}$	1	100	S, RU
写真	配 列	$F: N_o. \rightarrow$ 配列		MT 20本(100ft)	S, RU
状態図	ネットワーク	$F: E^2 \rightarrow$ ネットワーク	20	1000	DA, RU
合金データ	木構造	$F_p: E^9 \times P^m$	50	2000	DA, OU
	バケツ	\rightarrow データ			
ストラテジー	ネットワーク	目標 \rightarrow 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: ほんごファイルのレコードの更新は行なわれる。
 OU: しはしは更新を行なう。効率は端末を用いた検索条件の指定を行、これが
 5、その結果が出力されるまでの平均行時間を秒で示し、容量の単位はKBである。



← 図4-(a) 検索例。

融点について、単位°C
 で表示したもの。周期
 律表で周期を指定し、
 およぶ元素名と、特性
 値の高さの位置に表示
 したもの。

図4-(b)は多角形の下
 に示される候補材料中
 "INDEX="で示される元
 素の占める相対的位置。

P2

図4-(c)は、状態図情報の検索例を示す。図5は、各候補材料の線型評価関数に
 よる評価結果を示す。図6は、各ステップで、どのように対象とする材料が絞られ
 ていくかを示すもので、横軸にステップ、縦軸に対象材料の数を示す。各文字は、
 それぞれのステップの名称のイニシャルである。改良の可能性に対する評価も含
 めた対象材料の選定であるため、一般に情報検索システムで行なわれるよう
 な適合率の評価は不可能である。

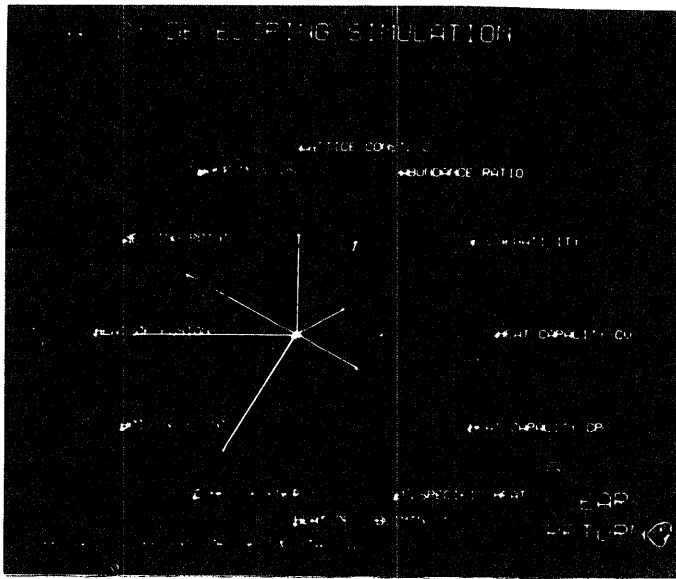


図4-(b) 物性値検索例

P2, P3

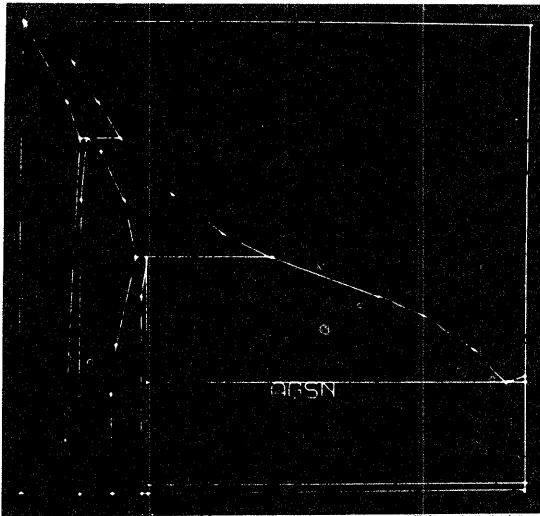


図4-(c) 状態図検索例 P2, P3, P4, P5

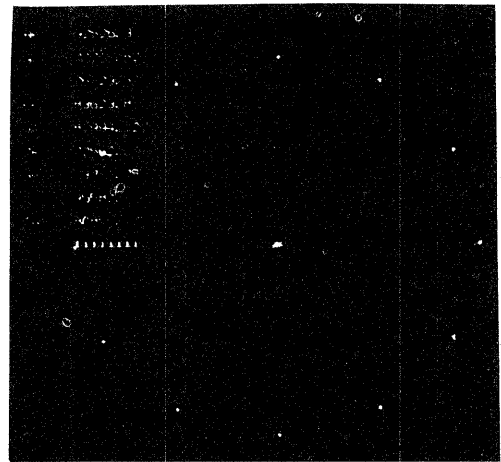


図5. 材料評価例 P3, P4

CAAD-Iの欠陥は、関連情報の表現方法に制限が多い。例えば、単作業、加工、熱処理の表現、又少に閉しては、何れ準備して"存"。=a=とは、数値的の意味でも論理的な意味でも離散的な点を生じさせた原因となった。又離散的であるが、存"が、の基礎情報であり状態図情報も極めて不足して"了(図7)

AGAL	50	AGBA	26	AGBE	24	AGBI	8	AGCA	44	AGCE	30	AGCR	12	AGCU	14	AGPB	12	AGPR	28	AGPT	72	AG S	38
AGSB	34	AGSN	32	AG U	18	AGZN	66	ALAU	48	ALCA	22	ALCO	48	ALCU	162	ALFE	62	ALIN	12	AL K	8	ALLI	36
ALMG	50	ALNA	10	ALNI	58	ALPB	14	AL S	22	ALSB	12	ALSI	10	ALSN	8	AL W	70	ASAU	6	ASBI	8	ASCO	24
ASCO	34	AUBE	34	AUBI	12	AUCA	64	AUCE	36	AUCD	20	AUCU	50	AUMG	36	AUMG	49	AUNI	32	AUPB	20	AUPT	48
AUSB	18	AUSI	12	AUSN	48	AU U	44	BCU	12	BFE	70	BTI	34	BABI	14	BACA	24	BANG	31	BAPB	46	BASN	18
BAZN	8	BESI	10	BE U	28	BEZR	38	BICO	16	BICU	14	CBSI	38	CB V	16	CBZR	34	CENI	50	COCR	78	COCU	42
BISI	12	RISN	16	BIZN	24	CCD	42	CCR	26	CFE	94	CO2N	108	CRCU	18	CRMD	16	CR O	22	CR P	16	CRPB	14
COLI	16	CONI	14	CO O	6	CO5N	50	CO V	18	CO W	46	CUFE	74	CU H	0	CUMG	40	CUNI	22	CU O	34	CU P	24
CR S	16	CRTI	46	CR W	20	CRZN	16	CRZR	34	CUFE	44	FE O	52	FE P	54	FERE	56	FESB	50	FE U	58	FE V	56
CUPB	18	CUSN	102	FE H	24	FEMG	20	FEMO	66	FE N	48	KZN	16	LIMG	48	LIPB	66	LISN	58	LITL	63	LIZN	122
FE W	52	HMN	34	HMO	18	HTI	26	KNA	14	KSN	34	MNPT	38	MNSN	42	MNZN	180	MO N	8	MOSI	34	MOTA	4
MGMN	10	MGNA	12	MGSB	42	MGSI	28	MGSN	30	MNNI	98	NISI	94	NITI	122	NI V	90	NI W	34	NIZN	76	OPB	26
MOTI	22	MO W	8	MOZR	40	NAPB	96	NASN	66	NI O	10	SNTI	144	SUZN	14	SNZR	38	TI U	142	TI V	28	TI W	38
OSN	28	S V	8	SITA	40	SITI	48	SI V	42	SIZR	53	AGMN	22	AGNA	10	AGNI	4	AG P	6	AGTI	28	AL B	32
TIZR	30	U V	34	VZR	32	WZR	30	AGAU	4	AGCD	24	AL V	22	AL Y	40	ALZN	12	ASCU	34	ASK	38	ASMN	44
ALBA	14	ALCB	40	ALCD	6	ALMN	104	ALTA	10	ALTI	46												
ASTI	14	AUCD	42	AUIN	70	AUK	30	AULI	0														

図7. 状態図名リスト

REDUCTION PROCESS OF VOLUME

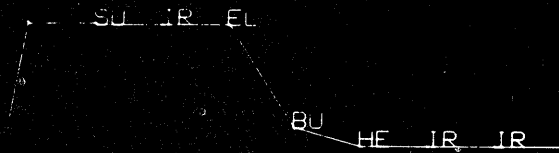


図6. 目標の絞り方を示す表示例。
縦軸には、各元素の上限と下限の差を加算した値の対数をとる。この図は、そのJOBでの合金開発の手順の評価に用いる。効率のよいものは、ファイルに蓄積して、好ましい手順として以後利用する。

§4. ADAM & EVEの目的その他

金属材料設計用システムの問題点、ADAM & EVEで解決したい問題は、以下の三つの点に集約される。

- i) 論理的および数値的不連続性の除去。→ M×C の記述方法の組織化。
- ii) システムの効率の向上 → 目的別、あるいは解法別に個々のサブシステムを作る。具体的には、次の5つを考えている。
 - ADAM & EVE-LWR: 特徴としては、データの統計的取扱い。(データ少量、不足)
 - ADAM & EVE-CTR: 特性値の推算手法中心。(データ極めて少量)
 - ADAM & EVE-SRD: 計算機シミュレーションによる-CTRの補完。(条件の近似)
 - ADAM & EVE-PNR: 天然資源の有効利用に関する計画の作成(コフレ)
 - ADAM & EVE-MSD: Microstructure Design (画像処理)
- iii) 単にデータバンクとして利用するのではなく、金属工学における知識体系を表現し、それを推論に利用する。このための第一歩として図8, 9, 10に示す情報構造に基くデータベースを確立する。TOOL-IR²⁾のような外部の文献検索システムの利用を考えたのは、個々の datum の評価は、最終的には文献を参照せずには済まずに済まなければならないためである。図中 $I(i, j)$, $I'(i, j)$ は、それぞれ画像の濃淡の数値的表現およびそれを参照しながら $I(i, j)$ を加工したものである。加工には、閾値処理、フーリエ変換等の一般的前処理の他に、 ψ による三次元的描像の推論を含む。

ADAM & EVEのよき研究者を主体としたデータベースシステム oriented コンピュータシステムでは、current な情報を最少の労力で(あるいは許容できる労力で)データベースに蓄積可能か、というのが、その成否の鍵がある。その意味で金属の分野での一般的知識をシステム内に表現し、その活用によって各研究者の労力を軽減することが、その開発の第一歩となる。情報の重要度の評価については、 ψ によって定義されるグラフの解析によってある程度の解決は可能と思われ、 ψ "メリ、ハリ" を持った図の出力については、その方法を見出し"存"。

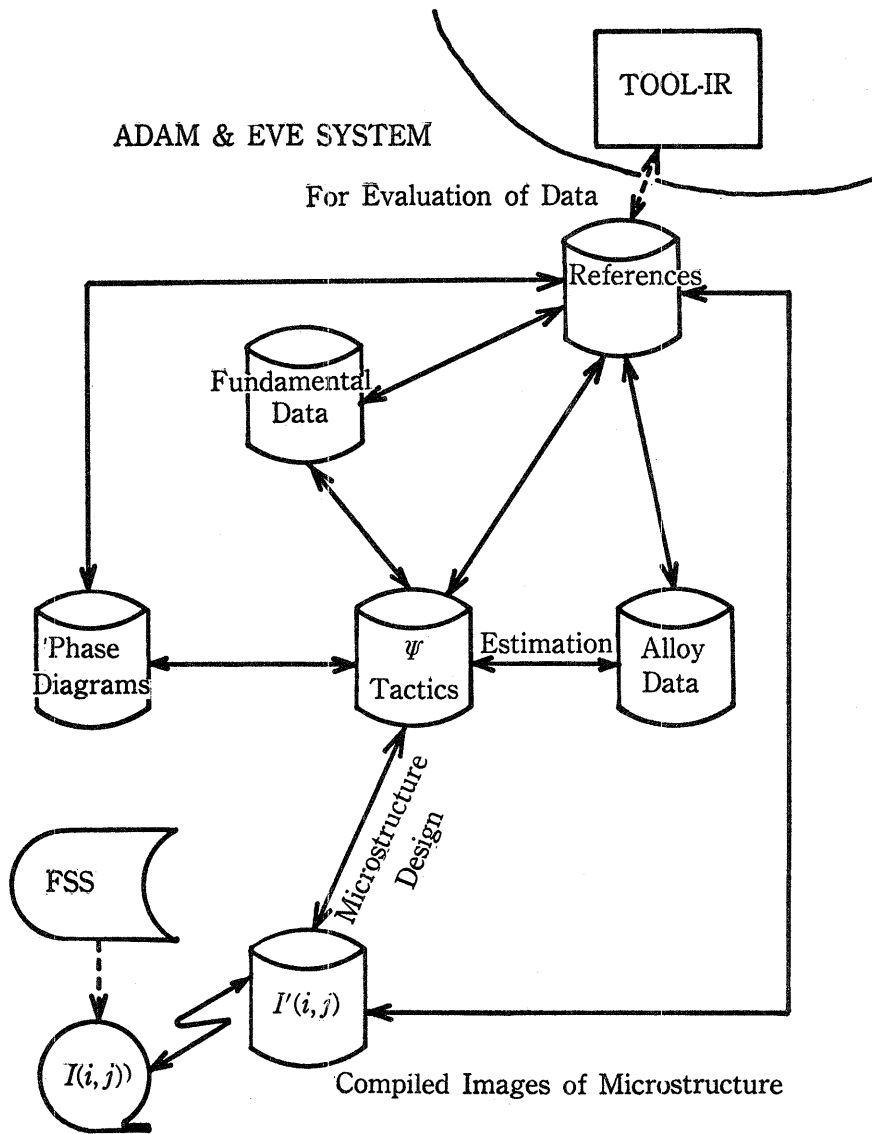
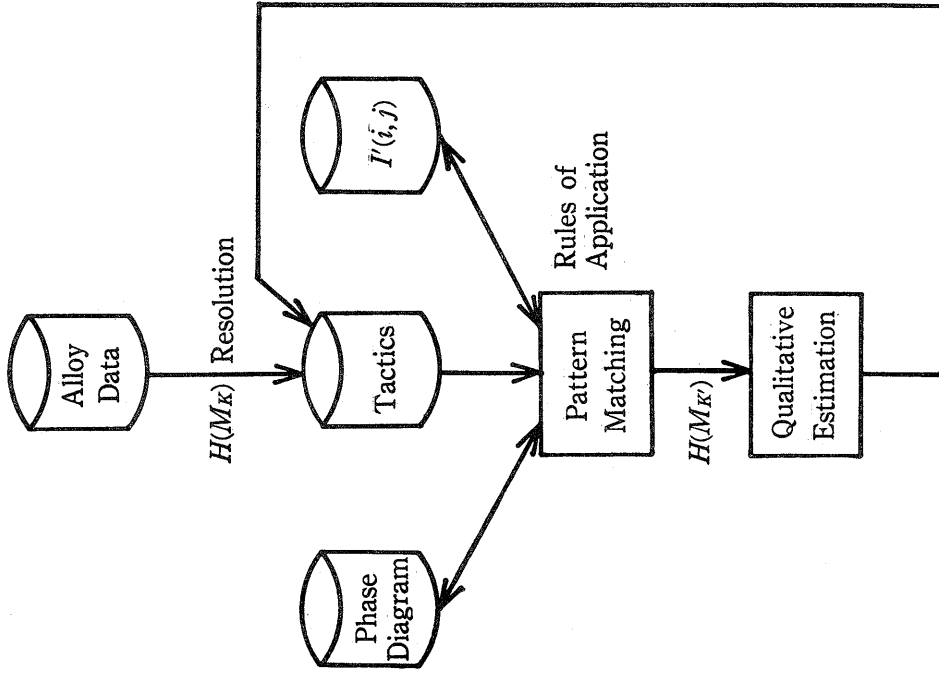
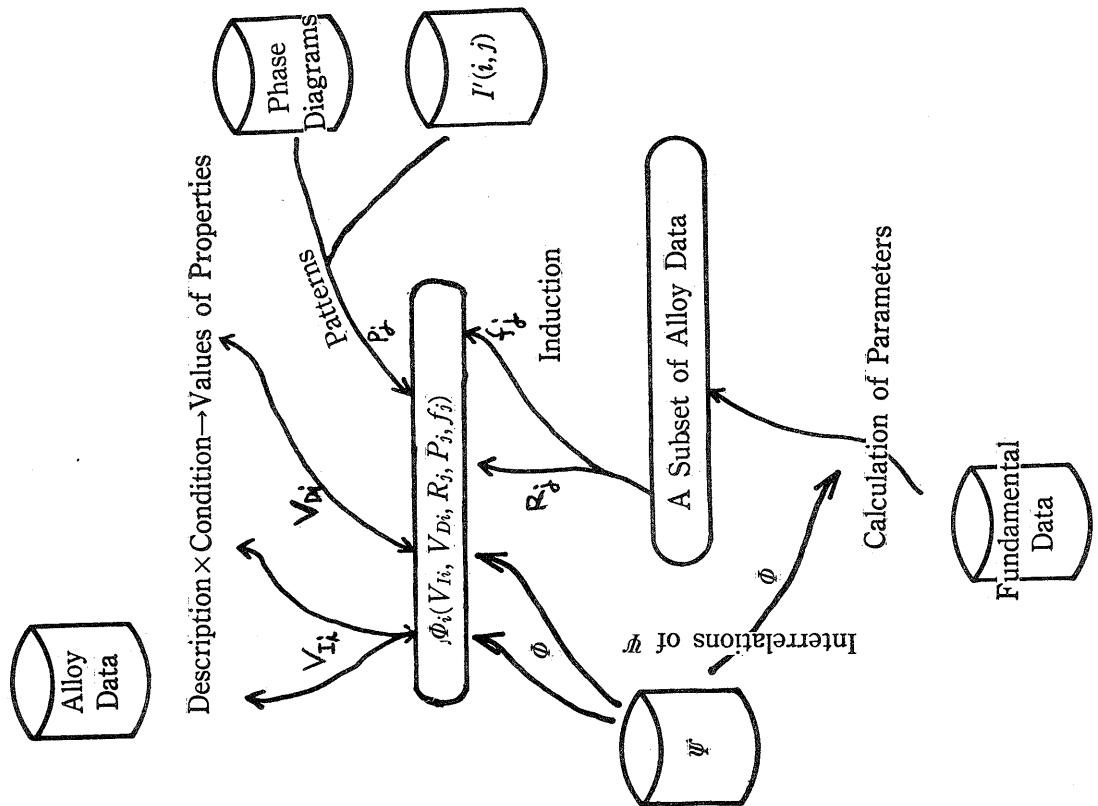


図8. ADAM & EVEの情報構造

参考文献

- 1) S. Iwata, Y. Mishima: "Pareto Optimum of Natural Resources", to be published
- 2) T. Yamamoto et al.: TOOL-IR: An On-line Information Retrieval System at An Inter-university Computer Center, Proc. 2nd U.J.C.C., Japan Convention Services, 159-169 (1975)
Alloy Design に関するサーベイ, ADAM & EVEの詳細について.
- 3) S. Iwata et al.: Alloy Design by Automatic Modeling & Estimation of Values from Experimental Data, J. of Faculty of Engineering, The University of Tokyo (B) Vol. 34, No. 4 (1976) を参照された。



↑図9. Tactics の小情報構造

↑図10. ψ の情報構造