

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、合金の利用者が示した使用目的、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、問題解決方略の評価、選取、個別的な知識の合成、推論のための入力と存在データの評価、選定などの複雑な処理が混在する。モデリングは、これらの総合化が課題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余裕がないので、適宜例を示すことにし、できる限りあいまいさを減らす努力を

する = とにする。

2. 合金テークの特徴

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、我々が取り扱ってきた存在範囲は、 $eV \sim MeV$ と拡大し、観測の可能性も $\sim fm$ まで微細になり、2113 = とか、寸法の上から極小の範囲にあたり2113。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、長期にあたり、2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することが多い。合金テークの特徴は、以下のようになる。

(i) 断片的である。

(ii) テーク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が、現象論的な記述まで、粗いスケールを持つ2113。

(iii) 時間、エネルギー、寸法のとらえ方の視軸にあたり、テーク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、テーク間の論理的な整合性がとれ2113 = ともある。

このように述べたから、データの形式としては、以下のような特徴を持つこととなる。

(a) フラットファイルを作成しようとするとき、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ければ、一次情報を加工し、目的に合わせたファイルを作成する際には、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ります。

(e) 数値には、単位がつく場合が多い。

(f) ギリとヤ文字、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は、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。

なくてはならない。

材料データベースとしては、QBE, INGRES, ADABAS, ORION, IDMS, PLANNER 等によつて、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、数千フィールドに達するような対象であるが、ここでは AVAIL DATA ファイルに、変数名と組で、つねに付いている。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る。

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を)、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を)、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、整理したものを)、小まじいデータファイル(実験データ + 解析コード)の4つのレベルを考えた。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、マスターファイルを構築するか、小まじいデータファイルにおくか、どのようなモデル構築が考えられるかについて、考察することを試みる。

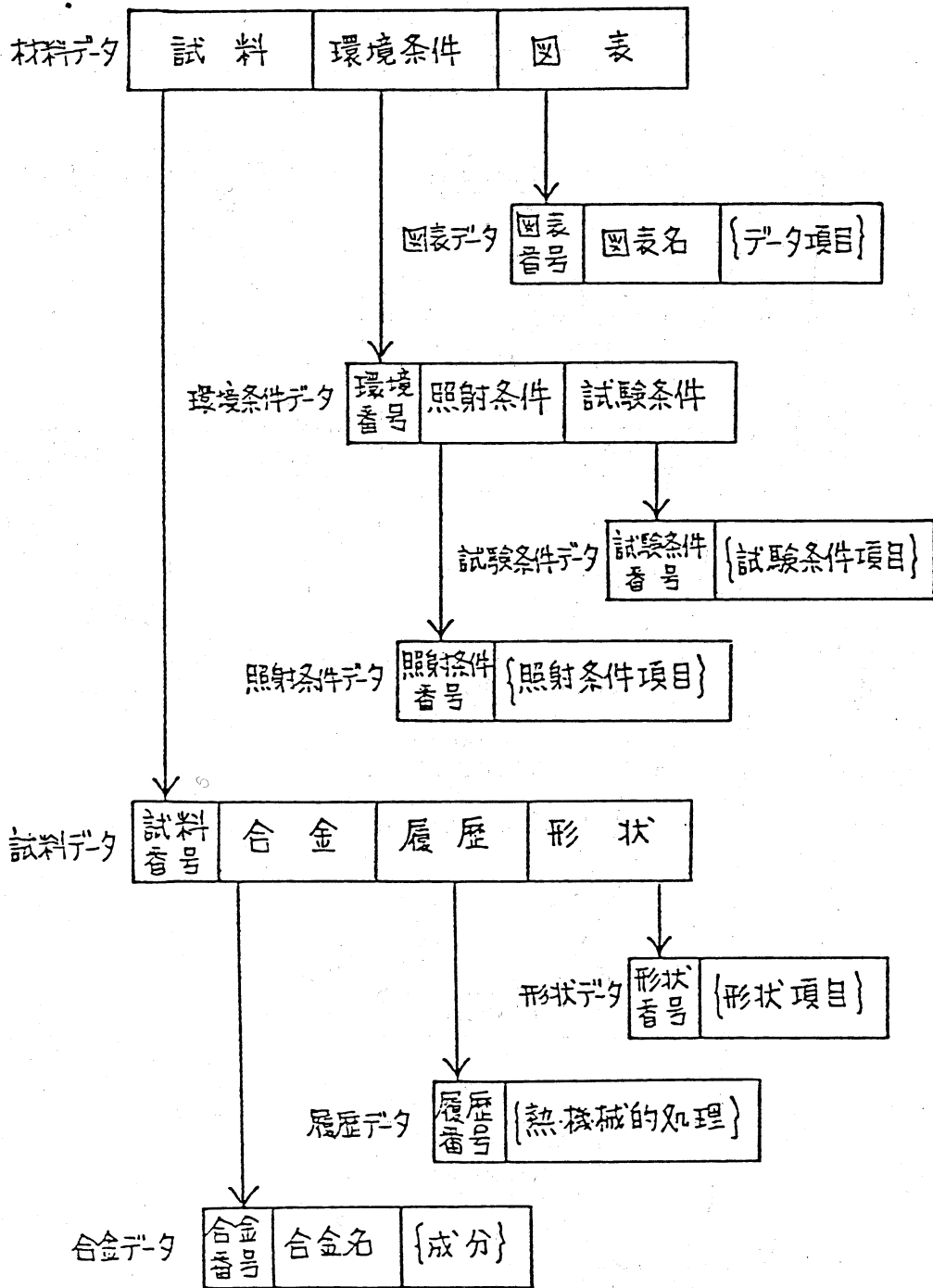


図 1. 材料データの構成

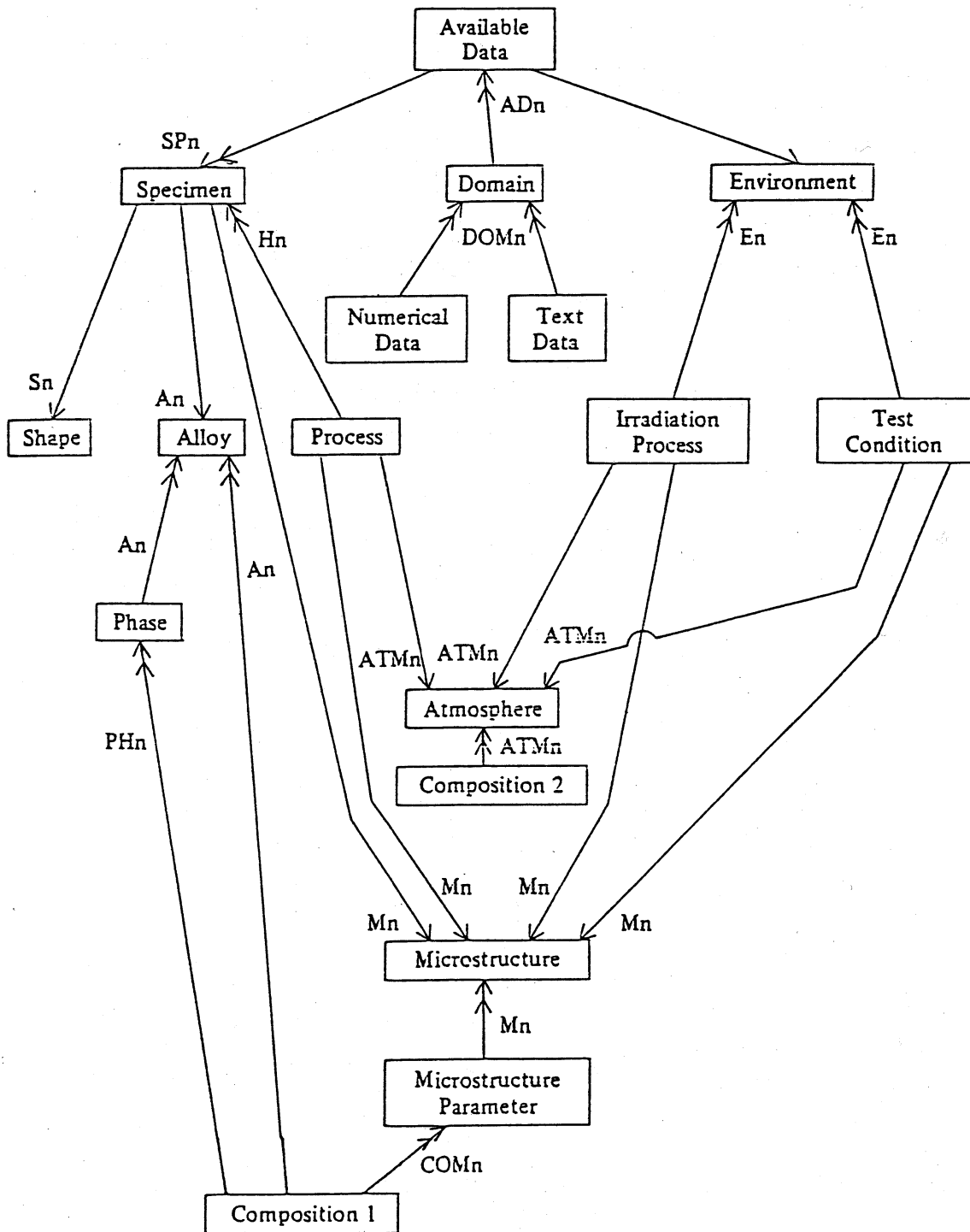


図2. 関係データベース管理システムでのデータ構造の概念図

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

PROCESS	ID	IN	SEQ. NO.	TYPE	ATM	*P1	*P2	*P3	*P4	*P5
	18	18	12	AB	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	COMP (AN)	NAME	COMMENT (CAD)	NUMBER OF PHASE
	18	18	A32	A32	12

PHASE	ID	COMP (AN)	COMP (PH)	PHASE NAME	*PHASE COMPOSITION	UNIT
	18	18	18	A32	3F8	AB

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

MICROSTRUCTURE PARAMETER	ID	IN	MICROSTRUCTURE PARAMETER NAME	COMP	UNIT	*VALUE	COMMENT
	18	18	A32	18	AB	3E12.5	A64

ATMOSPHERE	ID	NUMBER OF ELEMENT	COMP (ATM)	NAME
	18	12	18	A32

COMPOSITION 1	ID	INN	COMP	UNIT	*H	*He	*La	*Ku
	18	A2	18	AB	3F8	3F8	3F8	3F8

COMPOSITION 2	ID	ATM	NAME	*COMPOSITION	UNIT
	18	18	A32	3F8	AB

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	AD _n	TABLE NAME	NUMBER OF DOMAIN	NUMBER OF DATA	M _n	E _n	COMMENT
	18	18	A32	12	14	18	18	A64

DOMAIN	ID	AD _n	DOM _n	DOMAIN NAME	DATA TYPE	UNIT
	18	18	12	A32	A2	A16

NUMERICAL DATA	ID	AD _n	DOM _n	VALUE
	18	18	12	E12.5

TEXT DATA	ID	AD _n	DOM _n	COMMENT
	18	18	12	A64

ENVIRONMENT	ID	E _n	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	E _n	CONDITION NO.	TYPE	PARTICLE	INSTRUMENT	ATM _n
	18	18	12	A8	A3	A16	18

P1 PARAM _n	P2 PARAM _n	P3 PARAM _n	P4 PARAM _n	P5 PARAM _n	M _n	COMMENT
16	16	16	16	16	18	A64

TEST CONDITION	ID	E _n	CONDITION NO.	TYPE NAME	PARAM _n	M _n	ATM _n	COMMENT
	18	18	12	A32	16	18	18	A64

PARAMETER VALUE	PARAM _n	UNIT	MIN	MID	MAX
	16	A16	E12.5	E12.5	E12.5

図3.(b) 図2に示したデータベース構造のレポート型

ENVIRONMENT, IRRADIATION PROCESS, TEST CONDITION などのレポートは、構造変化の原因と
 なるもので、SPECIMEN レポートとの連続が
 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、演繹的存在法の積み重ねで合金設計を考えたこともできる。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、単純な系に限られた。

現実的には、精粗さまたまなレベルで記述された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る。これを設計プロセスの導過程と、この現実的存在場から整理してみると、以下のようになる。

(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

ものつたものに多し。耐食性は実験してみなければわからず、とこのが通説であるが、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し。

(ii) "シミュレーション" の適用

(i) 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、耐食性とこの重要な特性は、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この、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。

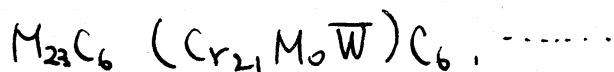
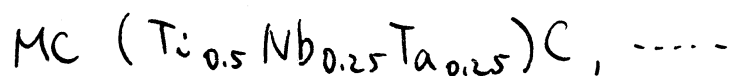
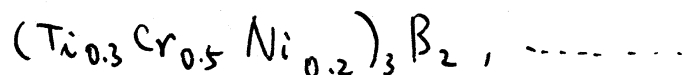
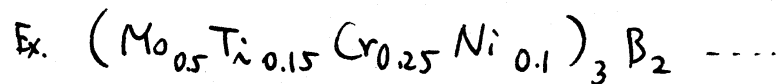
シミュレーションでは、作業仮説として、"ある構造" を設定し、場を与えて、構造変化を求め、特性を予測する。

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よう。

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。

$$\text{Ex. } \begin{cases} \bar{N}_V = 0.61 N_i + 1.71 C_0 + 4.66 (C_r + M_0 + W) \\ N_{V, \text{mit}} \leq 2.40 \\ \bar{N}_V^b = \sum_i (N_V)_i \cdot f_i^b \\ N_V^c = \sum_i (N_V^c)_i \cdot f_i^a \\ N_V^c - \bar{N}_V \geq 0 \end{cases}$$

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の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

⑥ 700セアの組立て

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, L_{12} 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ゝが、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”が交錯していゝ典型的な例で、合金設計プロセスにはおゝとも、同様のものが多ゝ。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、解が限定されていゝ、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、材料の種類によつて

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よ

うと、予測精度を向上させる。 (~ 3 次元)

クラスタ - 変分法 - 3次元のモデル

- イオン結合, 共有結合が、イオン性的特徴をもつものに対し、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、位置づけられた。

(ii) 構造(ミクロ組成/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、構造変化に関するコミュニケ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, ...
 空隙点密度, 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, パターンの表現などが混在した極大の扱いにくい情報となった。構造に関する記述があまりないで

く存ったときに、ひとつの解がえられたことに存る。

(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たことになり、構造変化をひき起す場の名称が、特性名と存り、場に対する応答がデータと存る。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存る。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なければならないことが、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と大きなものに順次、表現している場合、 \times が \sim について、同様の順序関係が存在しなくてはならない。
- ・現実的な立場からの抽象化・単純化は、しばしば行なわれる。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

$$\text{降伏強度 } \sigma_y = \sigma_0'' + k_y d^{-1/2} \quad (\text{ホーランド式})$$

d : 結晶粒径

k_y : 係数

σ_0'' は $\pm S$ に分解される。

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

d_{SG} : 亜結晶粒径

K_A, k_y' : 係数

f_A : 第2相の分率

σ_0' は寄与する項と $\pm S$ は、

$$\sigma_0' = \sigma_0 + \Delta\sigma_{SS} + \Delta\sigma_p + \Delta\sigma_d$$

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

$$\Delta\sigma_{SS} = \sigma_s \epsilon_s^{3/2} C^{1/2} / 700$$

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

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

存在がある。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た場合には、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、現象論的予測式を作ることが多い。現象論的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存在である。

(iv) 材料のふるまい

・材料のふるまいは、実機の使用条件に合わせたモデルである。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工学

存裏付けのある“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つてゐることがわかる。

5.2 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とくものはない。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とくことにし、今後の方策を考えこみ。

(i) リー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、ファイル名に関するデータ(×印データ)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 ↔ 構造 ↔ 特性 ↔ ふるまひ のそれぞれについてこの相関関係の導出

(iv) 予測精度の向上とこの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. おおりに

サイエンスとテクノロジーとの分極化は今に止まらず、問題では無い。前者が多分に分析的であり、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の位置づけがされる。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の含んである点で、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ければと考え、本誌の研究報告の貴重なスペースをとっていただいた。

文 献

- 1) 文部省科研費報告書 56850024 「材料設計とテクノロジーに関する研究」 p.119