

## 材料設計法のシステム化

展 望

岩 田 修 一\*

## How to Write Tactics for Materials Design in Computer

Shuichi IWATA

## 1. 緒 言

材料設計法とは言っても万能の金科玉条があるわけではない。それは、いくつかの成功例の報告と秘かに語られる多くの失敗例からなる知識から注意深く導出されるべき対象である。専門家は目的に応じて関係する事例を上手に整理して問題解決にあたる。エキスパートシステムはそうした専門家の思考方法を借用するシステムのことであり、それによつて高度な専門作業を支援することを目的としている。専門的作業は解析的問題と合成的問題とに大別されるが、これまで材料の専門家の多くは前者を対象としてきている。前者は解の存在が保証されており、体系化も容易であつたためである。この場合にも組織観察などでよく遭遇する不完全なデータによる推論の困難は依然として残るが、トップダウン的解析支援ツールによつて解決可能である。後者の合成的問題としては計画問題と設計問題が代表的である。一般にこれらは解空間が広く解の探索にはさまざまな工夫を必要とする。材料の場合は関連因子が多く複雑なため、個々の材料設計にそのまま活用できるようなデータやモデルが十分に整備しているとは言えない。このため最初から汎用の材料データシステムを構築しようとするのは無理が多い。従つて作業はまずそれぞれの目的に応じて関連する過去の事例を収集・整理することから始まる。データの使い方、推論の進め方についての知見を深めた後には作業仮説の生成・材料ふるまいモデル構築・製造プロセスの設計・結果の検証/評価といった合成的課題が続く。従つて究極的には材料設計システムを解析と合成の両面から設計者の支援をしてゆくシステムとして考える必要がある。

一方、材料設計の解の求め方は極限追求型と最適値探索型の二つに大別できる。前者ではデータベースはもともと不完全で外挿を主体とする推論・推算が必要であり、そこでの原理的な無矛盾性が重要である。一方、後

者では解空間についての知識ベースは整つており、そこでの解の探索は内挿が主体となり、予測精度の向上が第一の要件となる。これまでの材料設計の成功例の多くは後者に属するものであり、状態図の予測、特性-構造-製造因子間の統計的相関関係の抽出などの手法を目的に合わせて上手に“Ad hoc な手続き”としたものである。第一原理的な計算も適宜活用され、究極的な予測普遍性が追求されているが、設計技術として重要な他の評価因子としては、それぞれの予測手法のモジュール性、使いやすさ、データベースとの両立性、適用された知見の総合的なバランス、柔軟性などがある。この小稿では本格的な材料設計システムを想定して、材料設計に適用可能な代表的手法について横観し、おのおのの手法のシステム化についての検討を行う。

## 2. 問題の解法

材料特性の予測において、最も基本的かつ伝統的な手法は、それぞれの目的に合致した原理に沿つた計算を行うことである。力学の問題にはニュートン力学が有効であろうし、熱平衡を論ずる場合は統計力学の手法が利用できよう。材料の変形のマクロな取扱いには、材料力学的取扱いが適し、有限要素法によつて個々の具体的な課題についての数値解が得られる。われわれの材料に対する興味は、核的レベル、電子論的レベル、原子論的レベル、格子欠陥論的レベル、マイクロ組織レベル、連続体的レベル、部品レベル、システムレベル、資源的レベルとさまざまである。多種多様な解法の中から目的に合致し計算可能な手法(近似法)を上手に選ぶことが、専門家に要請される能力である。このことを計算機に代行させるための要件は、次のようなものである。

- ① 問題を解く手順が明確に述べられていること。
- ② その手順がプログラムとして実現されていること。
- ③ 適用範囲が定義されていること。

昭和 62 年 8 月 5 日受付 (Received Aug. 5, 1987) (依頼展望)

\* 東京大学工学部助教授 工博 (Faculty of Engineering, The University of Tokyo, 7-3-1 Hongo Bunkyo-ku, Tokyo 113)  
**Key words** : material design ; phase diagram ; electronic structure ; atomic structure ; lattice defect ; micro structure ; computer application ; crystal structure ; imageprocessing ; chemical equilibrium ; knowledge system ; work station ; intelligent gateway.

- ④ プログラムの停止条件が与えられていること・
- ⑤ 出力の妥当性を評価するための基準が与えられていること。

これらの条件を内部に矛盾を含まない形で、満足させることは困難で、われわれは個々の課題においてさまざまな試行錯誤をすることになる。試行錯誤については、二つの方向性がある。一つは、試行の効率を上げる方向であり、もう一つは、錯誤をできるだけ少なくする方向である。前者は予測普遍性を持つ手法の活用が主体となり、第一原理計算、状態図予測、各種特性予測シミュレーションなどが相当する。一方、後者ではデータベース、知識ベースの活用が重要である。以下、それぞれの手法の概要を紹介する前に、その前提となる材料情報の特徴を抽出してみよう。

### 3. 材料設計から見た材料情報の特徴

材料設計に関連した材料情報は、構造を中心にして、製造要因と特性とにそれぞれ関連づけられる。材料の構造はマイクロ組織となるが、その形態表現は、微小領域についての原子配置、原子構造など、物理的な実体に則した表現のほかに、それらを構成要素とした近似的表現、つまり(i)パターンなど、ことばによる記述、(ii)定量化した数値の組合せ、(iii)画像情報としての記述などの組合せによって実体を近似する。

パターンなど、ことばによる記述は、最も一般的で重要度が高い、われわれは、材料の中に生起している現象を、X線や電子線などをプローブとして使い、連続的な濃淡のイメージやスペクトルとして把える。このアナログ的な無限集合は、われわれが受け取る第1次の情報である。材料のさまざまな形態が部分的に認識され、計測され、名前付けられ、数値あるいは文字によって表現される。これは本来無限自由度のものを有限の情報で置き換える過程であり、それぞれ目的が設定され、さまざまな近似法が導入され、情報の欠落もある。材料設計にとって重要な点は、そうした不完全な表現が設計の基点となる構造に関わっていることにある。“我々はそのような情報から材料内部の構造を完全に再現できるか?”との問いは、これまで繰り返し投げかけられてきたものである。こうした課題については定量形態学、ステレオロジー、形の科学、画像処理などの分野で活発な研究が進められているので、ここでその内容をレビューすることはしないが、図1に示したように質的に異なる観測結果からいかにして“実体”を再構成するかは、材料設計の一つの大きな課題でもある。

構造-特性相関は、そうしたマイクロな構造に関する記述と材料特性とを関係付けることである。ドラッグデザイン、高分子などでは官能基の種類、平均分子量など<sup>1)</sup>、合金の場合には組成比、体積比、格子定数ミスマッチ、結晶粒径など<sup>2)</sup>、セラミックスでは、原子半径、イオン

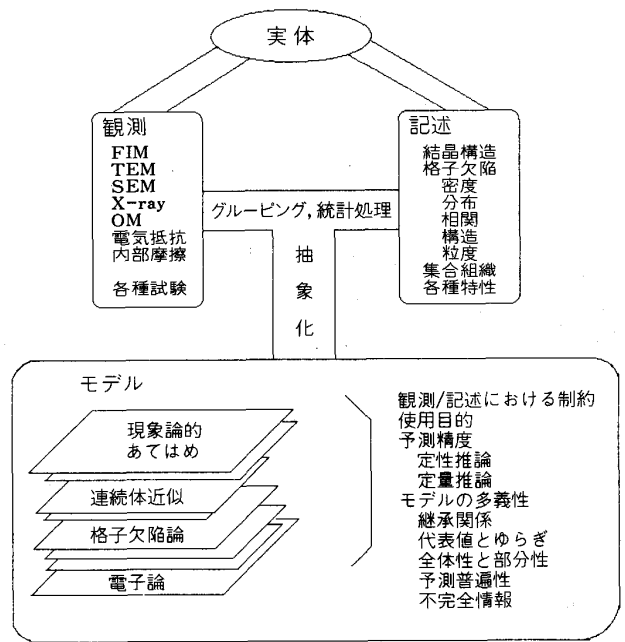


図1 材料の実体は、観測結果/試験結果によつて近似的に表現される。近似においては、原情報にグルーピング、統計処理、抽象化などの操作が加えられる。こうした操作の逆写像としての実体のモデルは、観測/記述における制約、情報の使用目的などを考慮して、構築される。実体が複雑なため、さまざまなモデルが構築され、相補的に活用されることになる。より根源的な要素の挙動に着目したボトムアップ的アプローチと、データベースを基台にした総合的な特性を基本的な要因へと分解してゆくトップダウン的なアプローチとが交錯して、実体についての最適近似への接近が計られる。

半径、構造型、配位数、電気陰性度など<sup>3)</sup>、それぞれの材料の設計において、マイクロ組織についての一般的な尺度の取り方がある。材料の一般的分類法は、原子間力、結晶構造、主要構成元素、製造業界など、さまざまである。軌道電気陰性度、原子軌道陰性度、遮蔽半径、平均混成率、禁制帯幅、電子密度などを第一原理的計算と結び付けた構造マップは<sup>4)~8)</sup>、状態図、変態図などとともに、より原理的な分類法を与えるものであり、構造の情報化に新たな視点を提供している。構造-特性相関については、変形機構マップ (Deformation mechanism map)<sup>9)</sup>、破壊機構マップ (Fracture mechanism map)<sup>10)</sup>などの機構マップは、そこに現象論的なデータの取扱いを越える内容を含んでおり、次の段階の知識システムについての示唆を与える。

いずれにしても、特定の構造と特性との相関は、試行錯誤を通して、名義尺度、順序尺度、比例尺度、間隔尺度などおのおのの情報の質にあつた位置付けと母集団の設定がなされ、よりよい見通しを与える相関が探索されていく。

画像情報としての記述は、さまざまな応用が考えられ

る対象である。マイクロ組織画像は、自然がわれわれに与えてくれた最も確実かつ重要な結論であり、今後とも、われわれが不断の対話 (Question and Answer) を継続していく対象であり、記憶媒体の制約などもあるが、パターンおよび定量化データとともに画像データベースとしてシステム化されるべきものである。

このように考えてくると、材料設計を考えたシステムの一部のイメージがおぼろげながら浮かんでくる。これを図2に示す。構造に関する記述は、共通領域である“3次元的な黑板”の上の像へと逆変換され、種々の表現の変換結果が妥当な線に落ち着くまで修正を繰り返す。データの評価、再編集、時には検索においても、こ

の黑板を参照しにゆくようなモデルである。画像データベースからのデータの検索・重ね合わせもきわめて有用である。図2と材料設計における推論の関係を表1に示す。

マイクロ組織設計については、製造要因Fと組織要因M、組織要因Mと特性要因Pの相関に基づき、Pに条件をつけてMに制約を与え、そうしたMを与えるようなFを探索する、という手順で解を得るのが一般的である。知識表現の形式、おのおのの知見のあいまいさの処理、シミュレーションプログラムや各種予測手法の活用法、上記の基礎データ活用、知識ベースの利用法など、システムとしては種々の知的レベルが想定される。表面的な知識の利用のみでは、そこに意外性のある結論が得られる可能性が少なく、そのためには深い知識の活用、発見的な仮説生成などを効果的に取り入れる必要がある。

以上の準備は、材料設計の全体像の再編成を可能とすることから、プローブの種類 (電子、中性子、光、X線、イオンほか)、母集団の大きさ、統計の取り方によつてそれぞれ階層化される。体系化された分野においては、上位の構造に関する知見は下位の構造に関する知見を包摂しなければならない。しかしながら材料設計のような新しい用途や素材を対象とすることの多い分野においては関連するデータもモデルも整備されていないことが普通である。このため断片的なデータおよびモデルをそれぞれの目的に応じた作業仮説で補い、材料設計を進めることが一般的である。構造表現に関するデータは、単に知識の適用の可否についてのパターンマッチングの対象となるだけでなく、それぞれの構造表現から派生する知識の階層化や、材料の使用期間中の変化をシミュレートするためのモデルの生成にも活用されるべきものである。

#### 4. 第一原理的計算・状態図予測

MURUZZI ら IBM グループによる金属元素の第一原理的バンド計算では、原子番号と結晶構造を与えるだけで、1気圧下の格子定数、凝集エネルギー、体積弾性率などが実験値との誤差 10% 以内で計算されている<sup>11)</sup>。多電子系の局所密度汎関数法を用いた自己無撞着計算、準粒子、擬ポテンシャル法、フロンティア軌道理論などによつて、扱いうる原子の組合せにはあまり制限がなくなり、計算速度の制約から、基底関数の数で数百から1000くらいが現在取り扱いうる最大値とされている<sup>12)</sup>。この種の第一原理的計算には、スーパーコンピュータも活用できるが、それぞれ問題ごとに専用のプロセッサを開発することも考えられる。しかしながら、いずれにしても“複雑さ”と“計算可能性”に還元論の限界があることには注意しなければならない。

一方、相互作用のある多体系では、従来の解析的理論や実験データの解析を補完する第三の方法として計算機

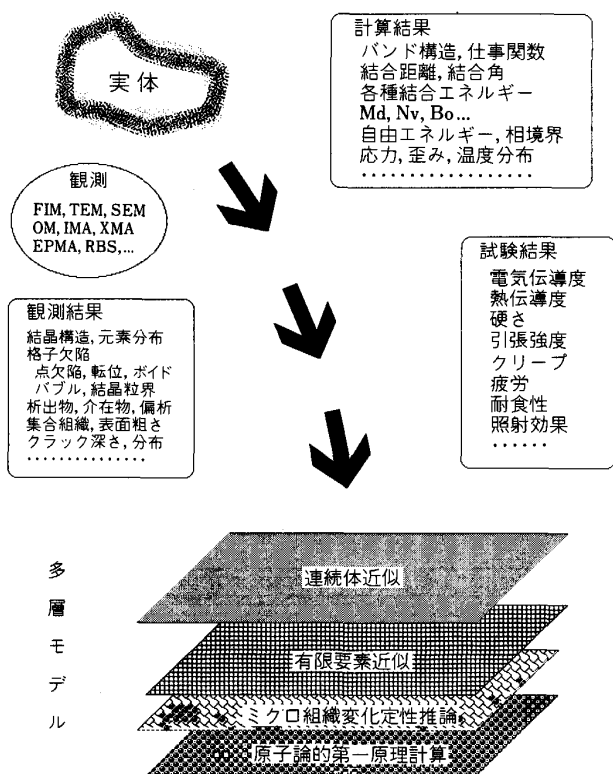


図2 材料設計システムのイメージ。観測結果、試験結果は、材料データベースとしてシステム化される。各種予測手法は、応用プログラムパッケージとして組織化され、計算結果は評価を経て、データベース化される。製造要因、観測結果、試験結果は非明示的に材料データベースの中で関係づけられたり、あるいは必要に応じて有向グラフとして明示的に表現される。個々のデータは範例となつたり、内外挿のための入力データとなつて、材料特性の予測に活用される。予測は、予測式、シミュレーションプログラム、完備な部分空間におけるあてはめなどによつて行われる。非手続き的な知識表現も原理的なモデルにおいては可能である。いずれにしても、入手可能なデータを活用して、合目的なモデルを形成することに材料設計システムの主要な目的がある。

表 1 材料設計のための各種手法の比較 [ . . . ] 内に代表的情報過程を示した

問題 解 法	制 約	材料設計例	註
応用プログラム 各種計算コード サブルーチンパッケージ	意味論的困難 [実体との対比] ・適用範囲設定の困難 ・停止条件 (計算精度/計算時間) の相対性 ・計算結果の評価基準の非形式性 計算手続きの非明示性	現象論的相関関係の利用 構造-特性間の多重回帰式など PHACOMP 法 Md 法	極めて伝統的手法であるが、これまでの成果を有効利用するためには、左記制約をできるだけ解消するための作業が必要である。具体的にはプログラムのモジュール化、既存のプログラムを活用するための知識ベースの整備、さらにはプログラム合成手法の確立などが考えられる。
材料データベース 範例の参照 [類推, 類比] ↓ 検索質問の生成 [検索, 翻訳] ↓ 出発物質の選定 [集合演算] ↓ 出発物質の改良 [内挿・外挿, 仮説生成・試行, 定性推論, 分散協調型推論] ↓ 候補材料の選定 [シミュレーション]	意味論的困難 [汎化, 集約, 抽象化] ・観測値のみから物質としての存在を再現できるか? (ステレオロジー, 形態表現における困難) ・データモデルにおける近似の妥当性 ・現象の多義性 (複雑さの反映) ・構造表現力の貧弱 ・シソーラスの保守・管理 ・知的ゲートウェイ ・範例の選び方・活用法 (試験法の標準化のみでは不十分である) 操作上の困難 ・試行錯誤を支援するヒューマンインターフェイス (グラフィクス, データベース, コマンド . . . ) ・応用プログラムとの両立性	候補材料のスクリーニング 一般応用分野 (Matus など) 新たな応用分野における材料選択 原子炉材料の選定 核融合炉材料の選定 CAAD-I ADAM & EVE 基礎データの参照 状態図データベース その他 切削加工データベース モデリング用データベース	材料データベースの利用においては、それぞれのデータがどのように記述されているかを知るということが大切である。このことは左記の意味論に關係しているが、利用者からみて材料データの複雑さを十分克服したシステムは開発されていない。材料データベースとしては数百の名前が知られているが、開発途上にあるものが多く、本格的な材料データベースは実現していない。こうした困難を克服するための概念として米国 NBS の知的ゲートウェイシステムがあるが、試験法等の規格が標準化された一般的なデータにその対象を限定したものである。より知的なシステムの構築のためには、AI (人工知能) 手法の適用も考えられる。その場合にもシステムとしての形式的な統一とその機能的側面とにトレードオフのあることに注意しなければならない。
有向グラフ 状態遷移の形式的表現 プロダクションルール セマンティックネットワーク . . . . .	論理的完全性の維持 (知識獲得との相補性) 構造表現力の貧弱 深い知識のインプリメンテーション ・現象の多義性の取扱い ・知識の多層性の処理	因果関係の直接的表現 [例示, 説明] 製造要因→マイクロ組織 マイクロ組織→特性 特性→材料ふるまい 材料ふるまい→部品性能 部品性能→システム性能 使用条件→マイクロ組織変化 否定的データによる支援 耐食性を考慮した材料選択 計算グラフ WIN (溶接知識ベース)	実用レベルに近い材料の開発においては、現象論的な因果関係の説明に留まる場合が多い。理論的な深い裏付けを持った知識が定量的な予測にまで活用できることは少なく、多くの場合は単調増加、単調減少といった大まかな傾向を示すか、特性予測式の形を決定できる程度のものである。この意味で、プロダクションルールに代表されるような有効グラフによる知識表現は現実的な意味を具備しているが、基になる材料データに対する透明度を考えた場合、わざわざルールベースのシステムを構成する利点は少ない。ただし過去の材料に起因する事故例など、否定的事例の知識ベース化はその情報の特性から現実的な解といえる。
論理的方法 述語論理 定性推論 類推 帰納 発想 . . .	材料分野における言語表現との差 ・ユーザーインターフェイス [変換, 翻訳] 要 計算効率/形式化の両立性 材料データベースとの意味論的対比 [帰納] 応用プログラム等、既存の資源との相補性	研究段階のシステムのみ ALADIN (Al 合金の設計) PERITUS (材料選択)	知的作業を行うためには最も論理体系が整備されたタイプのアプローチではあるが、システム開発の効率、推論速度、材料データベース/応用プログラムなどの既存の資源の活用方法、知識獲得によるシステムの成長など、多くの課題が山積している。材料設計としてはデータと知識の整合性の維持への応用が当面の興味ある課題であろう。

実験の寄与は大きく、その範囲は直接的な応用である諸物理現象の定量的な理解にとどまらない。つまり FERMI-PASTA-ULAM の原子鎖の非線形振動問題<sup>13)</sup>、ALDER 転移<sup>14)</sup>、動力学的方法による格子間原子の挙動、損傷形成過程のシミュレーション<sup>15)</sup> など、新たな課題を定性的に提示した例も少なくない。照射損傷の評価では、所予の原子番号、結晶構造、組成比、原子間ポテンシャルを基に初期の格子欠陥の分布やその後のアニーリングの過程を“臨場感を持つて非常に高い空間・時間分解能で観察”した結果がえられ、結晶性の効果、カスケード効果など現象を理解するための指針となり、またはじき出し損傷関数の導出など定量的な課題<sup>16)</sup>にも活用されている。

こうした第一原理的計算の第一の利点は、現実の実験

ではほとんど入手できない知見を、しかも相当の信頼度で得られる点にある。計算機の機能の拡大により、扱いうる粒子数、系の大きさや時間の増大も可能であるが、いずれにしても寸法、系の構成、境界条件、対応する実時間などに限界があり、おのおのの近似条件のもとで物理的な意味をもちうる情報を算出することに心がけなければならない。実機のもとの物理的妥当性を持った各種パラメータは、そのままではなかなか実用に結び付かないが、種々の目的に活用でき、多様な付加価値を生成する可能性がある。湯川・森永らによる耐熱、耐食合金の設計<sup>17)</sup>では電子軌道の重なり積分や合金元素の d 電子の軌道レベルが有効に活用されているが、原子半径、電気陰性度、凝集エネルギーといった元素名をキーにした

データベースに、それぞれの合金の構造に特有な、つまりおのおのの構造をキーにした特性パラメーターをデータベースとして整備することの重要性を示唆している。具体的な材料設計への展開はなお多くの試行錯誤を要するが、ここではそうした普遍性を持った特性パラメーターの算出とそのデータベース化にも大きな意義があることを強調しておきたい。

第二の利点は条件設定の自由度にある。作業仮説としての物質の構造の形成は計算機実験のよくするところで、超格子、クラスター、準結晶、超微粒子、薄膜など分野では実験的検証の強力なナビゲーターとなるべき手法である。数学的な思弁の産物としてはフラクタルがあり、形態形成の理論に大きな刺激を与えている。“自然は我々の教師である”と“自然は計算機が創り出すほんの一面面を実現しているに過ぎない”という見方はこ

うした二面性をよく表している。

以上の利点はあるものの、こうした手法は材料強度、耐食性など実用的に重要な特性と直接関係付けることを目的とするものではなく、偏析、析出、欠陥形成やそれらの相互作用などについての知見を得て、その質的な変化に付いての理解を深めることにその大半の目的はある。したがって、材料データシステムの構築の立場からは、おのおのの手法の深化とともに、そこから得られる知見の活用法、換言すれば“深い知見”と“実用的な知見”とを結び付ける“基礎データ活用知識ベース”の整備に今後の研究開発のもう一つの焦点がある。

構造の変化については、動的にはその場観察などによって連続的な画像として記録されることもあるが、一般的には、溶製、加工、熱処理、雰囲気などの外部の制御因子および結果としてのマイクロ組織の記述によることが多い。全体的な構造の変化については、化学平衡や反応速度論に基づくモデルが数多く知られている。また変化のパターンについても、定性的な数学理論による説明がある。しかしながら、そのような理論的なモデルを、そのまま材料特性予測に活用できる例は少ない。理論の基台とする事象は、多くの場合、実験条件や試料条件をそれぞれの理論の検証に適した条件、つまり理想化したものとして設定する。材料設計の場合は、材料の使用価値に焦点があり、理論の検証とは独立である。したがって、多くの場合、材料設計の対象となる事象は、理論の対象となつてきたような条件を複合したものとなるため、安直な推論が許されない。

材料設計のモデル構築の一般的な手法については、人間の高度の知的過程であり、今後とも明らかになる見込みは立っていない。最終的な最適化については、それぞれの設計者のセンスが重要となるが、そこに至るまでの方途としては、図3に示すような手順の高速化が重要であろう。

### 5. モデリング

モデリングは、唯一無二の絶対的な真実を求めることにその目的があるのではなく、与えられた目的にとって最適な解法を“その時の”知見で見出すことにある。モデル構築の容易さからいえば、モデロン<sup>18)</sup>、あるいはマイクロアクター<sup>19)</sup>といったモデルの素子を用意しておいて、それらの合目的な結合によつて所望のふるまいをするソフトウェア複合体を生成できれば良いことになる。集中定数系として議論できるような系については、ある程度道具だては揃っているといえる。材料のミクロな構造の場合には、基本単位として原子あるいは電子を考えると組合せの爆発が起こり、計算可能な微小な仮想的モデルの特性がバルクの特性に反映される場合を除いて有用ではない。点欠陥、線欠陥、面欠陥、体積欠陥などを基礎単位として考えた場合も同様な困難があるが、

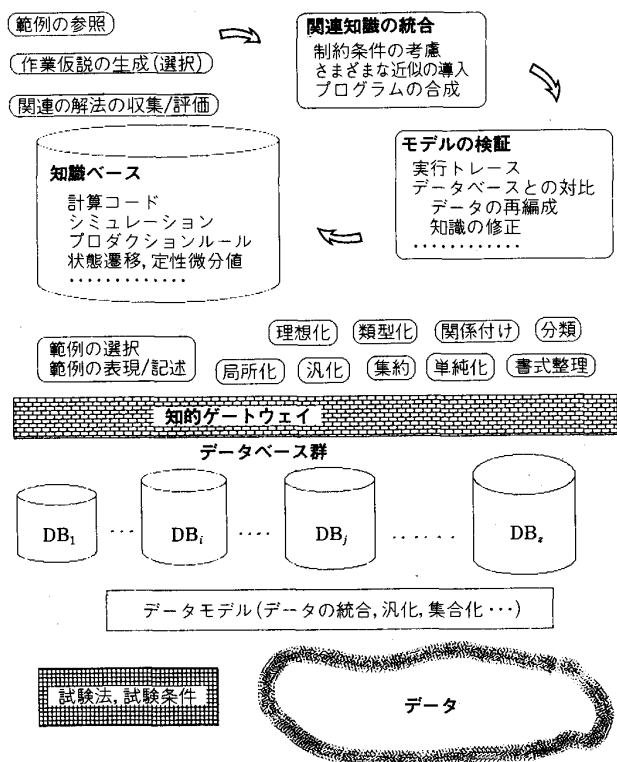


図3 材料設計におけるモデル構築。データを基台にしてデータベース群が形成され、知的ゲートウェイによつて有機的に結合され、さらに理想化、汎化、類型化等々の操作を経て、知識ベースが形成される。そうした知識ベースの中から、関連の知識を抽出し、適当な作業仮説のもとに関連知識を統合したソフトウェア複合体を生成し、結果の検証を行い、予測手法の改良のための知識・仮説の修正を行うことによつてモデルの改良が達成される。データの選び方によつても、知識体系は異つてくることから、データベースへの回帰は頻繁に行われることになる。

さらに微小単位ごとの相互作用があり、コミュニケーションモデルはその利点を失う。

転位論においては離散的な格子モデルと連続体モデルとを上手に組み合わせて、材料内のさまざまな現象の解釈を与えている。解ける、あるいは解きやすい問題への変換は数式処理の得意とするところではあるが、式を与えるまでの段階で同様の機能を発揮するシステムは知られていない。

我々が既に知っている解法を上手にモジュール化して、その範囲で合目的なシミュレーションプログラムを自動的に生成するようなシステムは上記の課題よりは容易である。問題はおのおののモジュールの内容をどのように表現するかにある。新しい発見は何かという批判はあるが、単なる当てはめを越えた、より高精度の内挿という点で大きな工学的意義がある。多数の実験による統計的な検証がきわめて困難な核融合炉材料の場合には実験計画自体が段階的な戦略を採っており、知識のモジュール化と再利用は重要な検討課題である。そのための第一段階としては、入手可能なデータと目標とする特性とのデータフローを明らかにすることが必要である。

専門家の巧みなどところは、一見、複雑と思われる問題を、解法のおかつた単純な部分問題の組合せに変換してしまうところである。例えば、クラックの進展というような複雑な現象を、原子間結合の切断、転位の挙動といった立場で扱うのではなく、その外の領域、つまり連続体として近似できるような領域におけるひずみエネルギーや運動エネルギーの値によつて把握すること、つまり破壊力学におけるJ積分とかT\*積分の利用である。合金設計の例としてよく引用される耐熱合金のクリープの場合も、その好例である。この場合、使用価値は、クリープ特性、耐食性などにあるが、そのあたりの評価は、実験データを参照することにして、問題をマイクロ組織の可否、格子定数の違いといった部分問題に分解する。マイクロ組織については、その概要は状態図によつて与えられ、マトリクスのおおよその安定性は、原子当たりの価電子の数といったもので与えられる。さらに詳細な評価は、d電子の準位とか仮想的な原子クラスターの結合状態によつてなされ、合金の詳細設計へと進むことになる。

このような問題変換の手順は、部分的に定義されている場合が多い。これを、システムとして活用する最も簡単な方法は、if~, then~といったプロダクションルールによる表現によつて知識システムを構成することである。応用例としては、有機材料の構造式の推定、病気の診断、原子炉運転のコンサルティングなど多くの例が報告されている。材料に関連しては、耐食性、耐応力腐食割れ(SCC)性のコンサルティングや、材料選択についての手順を支援するシステムなどがある<sup>20)~33)</sup>。ここでの問題点は、そのようなルールが膨大な数になつてしまつたときの全体としての妥当性の評価、部分的な知識の

保守、改善である。このことを容易にするための便法としては、典型的な場合における問題の把握の仕方を、“型紙”として準備しておくことである。例えば、SCCの場合には、応力、材質因子、環境因子を考えなければならないこと、応力、材質因子については、一般的な記述方法、あるいは算定方法が適用できるが、環境因子については、それぞれクラック近傍での環境条件が問題となるため、実験データに則した評価が必要であること、といった知見である。このような型紙は、“フレーム”といった概念によつてまとめることもできる。また、応力の算定方法といった所定の手続きは、入力データ・手続き名といった記述によつて、統一的に扱うこともできる。この方向性としては、抽象データ型(Abstract data type)などの代数的理論を活用することもできよう<sup>34)</sup>。

しかしながら既往の知識システムでは不十分な点も少なくない。知的材料データシステムを構築するにあつて課題となつている項目を以下に列挙する。

A: 材料設計に関係する知識は、数値的・数式的な強い表現ができないことが多い。機構の同定などはその代表例で、“材料Aの場合には、条件B下では、拡散が支配的である”、“粒界への元素Cの偏析が、脆化の第一の要因である”等々、比較判断、序数判断をする場合が少なくない。ファジー(Fuzzy)理論<sup>35)</sup>、Mycinの方法<sup>36)</sup>、主観的Bayesの方法<sup>37)</sup>、Dempster & Shaferの理論<sup>38)</sup>等々、部分的には材料の課題に適用できる手法も提案されているが、材料の場合それぞれの不確実な知識に対して確実度を事前に設定することも、その後、システム的に保守することもほとんど不可能であるため、いずれの手法も現実的ではない。

B: 材料の構造は極めて多様であるため、我々はその代表的な断面を観測できるに過ぎない。そうした断面から全体像を構築するための一般的手法はない。このため観測データに階層性を導入したり、さらには継承戦略を工夫して、少なくとも入手可能なデータに関しては整合性を持つた近似的“全体像”を描くことが試みられるが、そのための情報システムについてはシステム分析以前の段階にある。

C: 種々の妥当な作業仮説を設定して推論を進めることは、計算機物理の分野で数多く試みられている。条件としては、上述した条件①~⑤が満たされていることであり、組合せ的爆発の解決が最も重要である。この意味で、完全なad initio計算は不可能である。複雑な問題を求解の容易な部分問題に変換することも常套手段となつているが、解釈問題とは異なり、設計においては重畳効果の予測あるいは活用が重要となるため、実用上の課題は依然として未解決である。

D: 複雑な問題に対する一つの解法は、類似の問題を探索し、そこで自然が与えている結論-データを上手に活用することである。特に構造とその変化における類似

性は、多くの材料研究者の推論の糸口であり基盤でもある。結晶学的なデータベースについては整備が進んでいるが、今後の課題はそうした原子論的な描像と連続体近似との間にある“あいまいな (Ill-defined) な構造”の表現・活用法にある。画像データベース、マルチメディア型データベースの構築は、その体系化にあつての道具だてを与えるものであるが、画像の持つ意味とその活用法について、事前の十分な解析を必要とする。

E: 補雑な問題に対するもう一つの解法は、専門家の定性的な把握法をそのままシステム化する方法である。情報が不完全であるために専門家でも定性的に扱わざるを得ないのであり、知識の取扱いとしては、状態遷移、単調関数、定性的な微分関係の記述など、専門家の推論の進め方と合致している点も少なくない<sup>39)</sup>。

## 6. 結 言

人間が計画して意図的にする仕事というものは、それほど複雑ではない。また、実際に役立つ材料というものは、あまり複雑な挙動をしないことが多い。あまり複雑だと、使いこなせないからである。一方、材料に起因した問題の多くは、複雑な現象が絡み合っている場合が多い。このように考えてみると、規範となるような考え方を計算機システムとして実現することは可能であり<sup>40)</sup>、研究者の助手として、あるいは、次の世代への教師としてきわめて有用だと言える。

盲蛇におじずで“材料設計”と言いだしたものの、製造技術、解析技術、モデリング技術などの高度化を基台にした材料そのものの進歩、計算機技術の進歩、応用分野の変遷などの大波、小波にもまれて、はや17年目である。ともすれば稚拙な考現学や荒唐無稽な未来学とのそしりを免れないこともあつたが、当初より課題としていた材料データベース、知識データベース、画像処理、シミュレーションなどの技術が、最近になって、不完全ではあるが“便利な道具”として使用可能となつてきた。やつと本格的な材料データシステムを使うことを考えても良い世の中になつてきたのである。つまり入力データやモデルの選択、出力情報の評価・活用といった人間的な部分に専念できそうになつたということで、やつと材料設計システムもその実用化の時代を迎えたといえる。よりいつその研究者の増加を望みたい。

## 文 献

- 1) 例えば, E. J. COREY and W. T. WIPKE: Computer-assisted Design of Complex Organic Syntheses, *Science*, **166** (3902) (1969), p. 178, 藤本邦彦: 新材料開発と材料設計学 (三島, 岩田編) (1985), p. 120 [ソフトサイエンス社] など
- 2) 山崎道夫: 新材料開発と材料設計学 (三島, 岩田編) (1985), p. 230
- 3) 柳田博明: 学振 69 委-No. 4 (昭和 59 年 7 月)
- 4) D. G. DARKEN and R. W. GURRY: *Physical Chemistry of Metals* (1953) [McGraw-Hill]
- 5) O. KUBASCHEWSKI and C. B. ALCOCK: *Metallurgical Thermodynamics*, 5th ed. (1979) [Pergamon]
- 6) E. MOOSER and W. B. PEARSON: *Acta Cryst.*, **12** (1959), p. 1015
- 7) D. G. PETTIFOR: *Solid State Commun.*, **51** (1984), p. 31, D. G. PETTIFOR and R. PODLOUSKY: *Phys. Rev. Letters*, **53** (1984), p. 1080
- 8) J. K. BURDETT, G. D. PRICE and S. L. PRICE: *Phys. Rev.*, **B24** (1981), p. 2903
- 9) *Perspective in Creep Fracture* ed. by M. F. ASHBY and L. M. BROWN (1983) [Pergamon Press]
- 10) 増田千利, 田中統一, 西島 敏: 日本機械学会論文集, **48** (1980) 429A, p. 247
- 11) V. L. MORUZZI, J. F. JANAK and J. KANAMORI: *Calculated Electronic Properties of Metals* (1978) [Pergamon Press]
- 12) 大西橋平: 日本の科学と技術, **28** (1987), p. 22
- 13) E. FERMI, J. PASTA and S. ULAM: Los Alamos Report, LA 940 (1955)
- 14) B. J. ALDER and T. E. WAINWRIGHT: *Phys. Rev.*, **127** (1962), p. 359
- 15) 例えば, L. TEWORDT: *Phys. Rev.*, **109** (1958), p. 61, G. H. VINEYARD: *Radiation Damage in Solids*, ed. by D. S. BILLINGTON (1962), p. 291 [Academic Press] など
- 16) M. T. ROBINSON and I. M. TORRENS: *Phys. Rev.*, **B9** (1974), p. 5008
- 17) 森永正彦, 湯川夏夫, 足立裕彦: 日本金属学会会報, **23** (1984), p. 911
- 18) 沖野教郎: D & C NEWS LETTER 第 8 号 (精密工学会編) (1987 年 1 月 14 日), p. 136
- 19) 田中幸吉: 知識工学 (1984), p. 147 [朝倉書店]
- 20) A. J. BARRETT: *SAMPE J* 200 (1984), p. 29
- 21) L. BORZENSKI and S. LEBIEDIEVA: *Computer Science and Data Banks*, ed. by Z. S. HIPPE and J. E. DUBOIS, Polish Acad. Science, Warszawa (1984), p. 63
- 22) I. F. CROALL: *Expert Systems—the Application of New Computer Methods to Corrosion Problems; Ind. Corros.*, **2** (1984) 5, p. 13
- 23) J. R. DIXON and M. K. SIMMONS: *Computers in Mechanical Engineering* (1983) Nov., p. 10
- 24) P. P. DORGIE, K. PARMESHWAR and W. R. D. WILSON: *Trans ASME, J. of Mech. Design*, **104** (1982), p. 126
- 25) *Building Expert Systems*, ed. by F. HAYES-ROTH, D. A. WATERMAN and D. B. LENOT (1983) [Addison-Wesley Reading]
- 26) P. SARGENT: *Metals and Materials*, **1** (1985), p. 540
- 27) A. SHOSHANI, F. OLKIN and H. WONG: *Proc. 9th Int. CODATA Conf.*, Jerusalem (1984)
- 28) H. SOWIZRAI: *Ann. Rev. Info. Sci. & Tech.*, **20** (1985), p. 1
- 29) L. STEELS: *Future Generation Computer Systems*, **1** (1985), p. 4
- 30) N. SWINDELLS and R. J. SWINDELLS: *Metals & Materials* (1985) May, p. 301
- 31) V. WEISS and D. W. AHA: *SAMPE Proc.*, **29** (1984), p. 506
- 32) V. WEISS: *ASTM Standardization News* (1986) Apr., p. 30
- 33) V. WEISS: *Proc. 31st Sagamore Army Materials Research Conference* (1986) [Pergamon Press]
- 34) 稲垣康善, 坂部俊樹: 情報処理, **25** (1986), p. 47
- 35) L. A. ZADEH: *IEEE Trans. System Man & Cyb.*, SMC-3 (1977), p. 28
- 36) E. H. SHORTLIFFE and B. G. BUCHANAN: *Mathematical Bioscience*, **23** (1975), p. 351

- 37) R. O. DUDA, P. HART and N. J. NILSSON: Nat. Computer  
Conf. (1976)
- 38) 石塚 満: 電子通信学会誌, **66** (1983), p. 900
- 39) Artificial Intelligence, Special Volume on Qualitative

- Reasoning about physical Systems Physics, **24** (1984),  
p. 1
- 40) M. D. RYCHENER: Proc. aaai-86, **2** (1986), p. 878 [Morgan  
Kaufmann Publishers]
-