

# Materia Japan

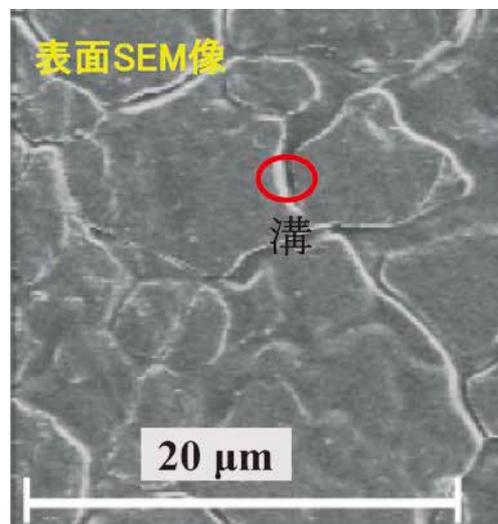
- 金属素描
- ミニ特集  
「マテリアル・プロセス・計測インフォマティクスを一層推進するための最新数学・情報工学の基礎と材料工学への適用例」
- 「新技術・新製品」

# まてりあ

Vol.58 MTERE2 58 (1) 1~64 (2019)

2019

1



# 弾性定数 $C_{ij}$ 測定の実況と今後

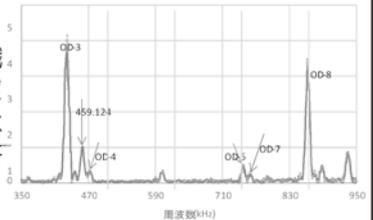
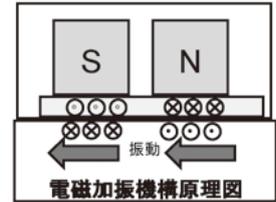
弾性定数(弾性スティフネス  $C_{ij}$ )の測定法は数種類あります。新素材開発時点で要求される小試料測定で最適な装置が電磁超音波共鳴(EMAR)式弾性率、弾性定数測定装置 CC II シリーズです。従来の RUS 法に比べて振動モードを特定して測定できることから、弊社では測定の可能性を以下のように順次拡大しています。

結晶構造：立方晶→正方晶→六方晶→斜方晶→多結晶

試料形状：立方体→直方体→円柱→小円薄板

試料材質：磁性金属→比磁性金属→セラミックス→樹脂→木材

この進展には測定子構造、振動発生機構、解析手法などが複雑に絡んでいますが、材料組織と弾性の基本技術を高度に意識しながら解析する必要があります。組織構造のわずかな変化、不純物の混入などによる力学定数の変化から組織構造などを解明する方向への研究にも利用されそうな予測があります。これらの前進には材料の最先端研究者と装置メーカーとの連携は欠かせません。ぜひとも最先端研究においてご利用いただきつつ、ご指導いただきますと幸いです。



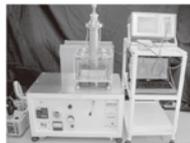
10φ x 2mm アル合金の振動

**$C_{ij}$  測定は力学特性から組織解明を可能に**

## 電磁超音波共鳴式 弾性率・弾性定数装置 CC II - シリーズ

- 異方性単結晶から多結晶まで
- 弾性定数(弾性スティフネス  $C_{ij}$ )も弾性率も
- 5mm 程度の立方体、直方体から円柱、円板、薄板(0.2mm)まで
- 室温用、高温用  
(常用 1000°C 最高 1200°C)
- 阪大基礎工 平尾・荻研開発

CC2-HT



**弾性率と内部摩擦の高温測定で最高の装置**

## 高温弾性率等同時測定装置 EG-HT

- 最も信頼性の高い高温測定が可能。  
粘性による振動数依存誤差が最小。
- 強力共振機構で難共振材に対応。  
難共振時の偽振動が最少。
- 多くの測定条件、測定項目に対応。  
ヤング率、剛性率測定  
ポアソン比算出  
温度依存性、ひずみ依存性  
2種の内部摩擦測定
- 最高 1200°C EG-HT&LT



**室温や比較的低温で最も信頼性の高い装置**

## 自由共振式弾性率、内部摩擦測定装置 JE-RT (ヤング率) & JG-RT (剛性率)

- 高精度・簡単操作・高再現性・迅速測定  
非接触加振、非接触検出  
試料も置くだけ
- 幅広い試料形状 (室温装置)  
短冊状でも細線・丸棒でも  
薄く・小さいものから厚く長いものまで

JE-RT  
& JG



**他の試料形状や測定目的に対応**

## その他の製品

- ▼ 薄板・細線用弾性率測定装置 TE, TG シリーズ
- ▼ 縦共振式ヤング率測定装置 VE シリーズ
- ▼ 圧電共振式弾性定数測定装置 CC シリーズ
- ▼ インパクト式ヤング率測定装置 IE シリーズ
- ▼ 強制振動式内部摩擦測定装置 MS シリーズ  
(メカニカルスペクトロメータ)
- ▼ 共振式薄板疲労試験装置 RF シリーズ

IE, VE を除き、  
高温用 (\*\*-HT) あります。

RF-RT



共振法応用の弾性率や内部摩擦等の物性測定・試験・計測装置の開発専門企業

日本テクノプラス株式会社 <http://www.nihon-tp.com/>

06-6390-5993 info@nihon-tp.com 〒532-0012 大阪市淀川区木川東 3-5-21 第3丸善ビル

# 1

2019  
Vol.58  
No.1

# まてりあ

ご挨拶	年頭のご挨拶 杉本 諭	1
紹介	公益社団法人日本金属学会の組織と活動状況	3
企画にあたって	連載「金属素描」「金属なんでもランキング」について 竹田 修 森戸春彦 榎木勝徳 安達正芳 齊藤敬高	4
金属素描	No. 1 チタン(Titanium) 上田恭介	5
ミニ特集「マテリアル・プロセス・計測インフォマティクスを一層推進するための最新数学・情報工学の基礎と材料工学への適用例」		
企画にあたって	足立吉隆	6
能動学習の基礎と材料工学への適用例	日野英逸 田口優介 上野哲朗 小野寛太	7
ベイズ最適化の基礎と材料工学への応用	松井孝太 金森研太 豊浦和明 竹内一郎	12
パーシステントホモロジーの基礎と材料工学への適用例	平岡裕章 大林一平	17
スペクトル解析のための統計的機械学習	志賀元紀	23
材料工学における数学、情報工学への更なる期待	足立吉隆 Zhi-Lei Wang	29
新進気鋭	Ti-Ni 基合金の低温におけるマルテンサイト変態と Intermediate 相 木村雄太	33
新技術・新製品	フッ素添加中性塩水溶液を用いたステンレス鋼の電解式表面改質法 山本正登 王 栄光 土取 功 佐藤直子 中井 誠	38
	電気自動車用高耐摩耗性銀めっき膜の開発 成枝宏人 宮澤 寛 菅原 章	41
材料ニュース	極低温超弾性の発現とその弾性熱量効果 新津甲大 許 勝 木村雄太 大森俊洋 貝沼亮介	44
先達からのお便り	私の研究履歴 足立裕彦	47
はばたく	高温酸化物融体に関する研究を通じて 原田祐亮	49
スポットライト	これぞ日本の伝統金属加工技術：木目金&煮色着色！ 高橋 駿	50
本会記事	会告 51 会誌・欧文誌 1 号目次 60 金属学会セミナー 57 次号予告 61 支部行事 58 行事カレンダー 62 掲示板 59 新入会員 64	

まてりあ・会誌・欧文誌の投稿規定・投稿の手引・執筆要領、入会申込書、刊行案内はホームページをご参照下さい。  
<http://jim.or.jp/>

【今月の表紙写真】 SUS304 鋼 2B 材の電解処理後の表面形態(SEM 像)。(山本正登他：本号38頁図4より改変)

表紙デザイン：北野 玲  
複写をご希望の方へ

本会は、本誌掲載著作物の複写に関する権利を一般社団法人学術著作権協会に委託しております。本誌に掲載された著作物の複写をご希望の方は、(一社)学術著作権協会より許諾を受けて下さい。但し、企業等法人による社内利用目的の複写については、当該企業等法人が社団法人日本複写権センター((一社)学術著作権協会が社内利用目的の複写に関する権利を再委託している団体)と包括複写許諾契約を締結している場合にあっては、その必要はありません。(社外頒布目的の複写については、許諾が必要です。)権利委託先 一般社団法人学術著作権協会  
〒107-0052 東京都港区赤坂9-6-41 乃木坂ビル3F FAX 03-3475-5619 E-mail : info@jaacc.jp <http://www.jaacc.jp/>  
複写以外の許諾(著作物の引用、転載、翻訳等)に関しては、直接本会へご連絡下さい。

# 年頭のご挨拶

公益社団法人 日本金属学会 会長 杉 本 論

新年、明けましておめでとうございます。皆様にはご健勝で新年をお迎えのこととお慶び申し上げます。

昨年は、6月の大阪府北部を震源とする地震、7月の西日本を中心とする豪雨、8月の台風13号、そして9月の北海道胆振東部地震、など様々な自然災害が日本を襲いました。被害にあわれた皆様の中には、依然として復旧への糸口がつかめない中で、新たな年明けを迎えられた方もいらっしゃるかと存じます。改めて心からお見舞い申し上げます。本会においても、金属及びその関連材料の学術及び科学技術に基づき自然災害やエネルギー問題を始めとする我が国が抱える諸問題に対して、真摯に貢献できる学会活動と、若手人材育成がより一層求められていると感じております。また、本年は公益社団法人として7年目の事業年度に入りますが、引き続き公益目的事業を公正かつ適切に推進していくことも重要と存じます。



以下に、昨年会長就任の挨拶にて紹介させていただいた本会の活動方針から、現状と課題の一端を報告させていただき、それを踏まえた本年の方針を述べさせていただきます。

ご存知の通り、一昨年、本会が将来においても基盤材料から先端材料までを対象とし、材料系学協会の中でもリーダーシップを発揮して世界にアピールしていく学会として発展できるよう、具体的な学会像を示した本会のビジョンを設定しました。昨年は、主として、その実現に向けたアクションを起こしてきた年でしたが、本年はさらに継続かつ推進していく年であると位置づけております。

まず、刊行事業では、会報、会誌、欧文誌は学会活動の根幹を成すものと捉え、各編集委員会では共同刊行事業も含めてさまざまな対策を講じ、その刊行を推進してきました。本年も「あたりあ」では、日本金属学会に入会し会員を継続したくなるように入門講座や講義ノート等の学術及び技術並びに情報の記事を充実させていきます。さらに、金属及び関連材料に関する情報が知りたいときに必ず手に入る情報誌であることを実現させるために、誌面や記事構成の更新等を推進して参ります。日本金属学会誌では、日本語で書かれた最新知見の発信や高度な専門性のある提案・意見交流・学理追求の場として維持向上を図るために、積極的な投稿勧誘等を進めていきます。Materials Transactionsでは、日本の代表的な材料系英文論文誌となるよう高度化するとともに、インパクトファクターの向上を目指し、ReviewやOverviewの掲載や査読の厳格化等によって掲載論文の質を向上させることを目指します。さらに、質の高い論文が掲載されていることの周知やオープン化拡大等の掲載論文引用の促進等の施策を推進する予定です。学術図書類は、既刊コンテンツのデジタル化及び理数探求科目履修支援のためのコンテンツ制作を推進していきます。

学会として重要な**講演会・講習会事業**では、講演大会を情報発信と研究者・技術者の交流の場として位置付け、立場の異なるいずれの研究者・技術者にとっても魅力あるものとなるよう分野ならびにセッション改編に取り組んできました。本年の秋期講演大会から新しい枠組みで講演募集をする予定です。一方で材料研究の多様化・細分化が進んでいることを考え、他の学協会とも連携を積極的に進めてきました。昨年5月にパシフィコ横浜で開催された自動車技術会の材料フォーラムには、本会から推薦した2名の研究者に講演をしていただき、逆に本会の9月の秋期講演大会では、自動車技術会の材料フォーラムで鑑講演をしていただいた自動車メーカーの方々に講演していただく合同シンポジウムを日本鉄鋼協会とともにスタートさせました。この企画は本年も継続していくことを3学協会を確認しています。このような取り組みによって秋期講演大会の参加者も2年連続で1,600名を超え、活気ある講演大会になってきています。さらに本年は講演大会参加者の利便性を向上させるために、講演概要集のWeb化を推進していく予定です。セミナー・シンポジウム委員会でも、昨年からスタートしたフェロー制度を利用し、本年には基礎から最新の研究や技術までを学べるセミナーの開催や次世代を担う人材の教育と育成に貢献する魅力ある講習会等を計画中です。

**調査・研究事業**については、我が国の材料科学を先導していくことを目指し、昨年、従来の分科会を調査研究委員会と位置付け、有効な活動が推進できるような体制強化のための再編を行いました。本年は再編した分科による活動を推進していきますが、この中で特筆すべきものに、今後の材料科学分野を担う若手研究者を中心とした研究会の発足を促すとともにこれらに対する助成、さらに若手研究者の育成を目的とした研究助成事業の開始が挙げられます。一方で、金属・材料科学分野に興味を持つ、さらに若い世代を育てることも目指しており、秋期講演大会時のWorld Materials Day Awardや春期講演大会時における企業説明会などを継続させる他、昨年からスタートさせた秋期講演大会時における高校・高専学生ポスターセッションの継続も検討していき、今後もこのような学校教育の支援や青少年向けイベントの開催、若手交流等の人材育成に関する事業を拡充していきます。国際学術交流は、従来から推進しているTMSおよびKIMとの交流等の推進に加えて、講演大会における国際セッションの開催を検討しています。

**表彰・奨励事業**は、会員の皆様の研究活動の意欲を高めるとともに、人材の育成にも欠かすことのできないものです。本年は各賞の授賞目的と対象を再整理し、将来の更なる発展が期待できる若手を対象とした賞の拡充等を推進していきます。

上述以外にも、本会の活動を広く世間に周知するために、広報活動を推進する体制を強化していく所存です。皆様のご協力をお願い申し上げます。

最後になりましたが、これまでの諸先輩およびご関係の皆様の本会へのご尽力、ご貢献に深く感謝申し上げますとともに、本会のさらなる発展および会員各位のご健勝とますますのご活躍を祈念致しまして、年頭のご挨拶とさせていただきます。

2019年1月1日

**2019年春期（第164回）講演大会**  
**3/20（水）～3/22（金）**  
**東京電機大学 東京千住キャンパス**

付設展示会  
大会プログラム広告  
講演概要集DVDジャケット広告  
ランチョンセミナー

**募集のご案内**

**付設展示会（機器・ソフトウェア・書籍）**

・1コマ ￥140,000（税別）

**大会プログラム広告**

・1色1頁 ￥70,000（税別） ・1色1/2頁 ￥40,000（税別）

**講演概要集DVDジャケット**

・表4カラー ￥75,000（税別） ・表2カラー ￥50,000（税別）

**ランチョンセミナー**

・1枠 ￥100,000（税別） 付設展示会ご出展の場合は、1枠 ￥20,000（税別）

**2019年秋期（第165回）講演大会**  
**9/11（水）～9/13（金）岡山大学 津島キャンパス**

広告掲載・ご出展のお問い合わせ・お申込み

**株式会社 明 報 社**

**MEIHOSSHA**  
ADVERTISING AGENCY

〒104-0061 東京都中央区銀座七丁目12-4 友野本社ビル  
TEL (03) 3546-1337 FAX (03) 3546-6306  
E-mail info@meihosha.co.jp ホームページ www.meihosha.co.jp



公益社団法人日本金属学会は、『金属に関する理論ならびに工業の進歩発達をはかること』を目的とした学術団体として1937年2月14日に創設され、2013年3月1日には公益社団法人に移行しました。会員数は平成30年2月末時点で国内外合わせて5,095名、156団体で、金属及びその関連材料に関する研究成果を世界に発信する学会として活動を展開しています。近年は、社会基盤材料をはじめエネルギー材料、エコマテリアル、電子・情報材料、生体・福祉材料、材料と社会と対象分野も拡大し、金属及びその関連材料分野の学術および科学技術の振興を目的として、組織図に示すように、最高議決機関である「社員総会」、業務執行決定機関の「理事会」、業務監査機関の「監事」の下で、「委員会」、「支部」、「事務局」により、学術誌や学術図書の刊行、講演会や講習会の開催、調査・研究、表彰・奨励の事業を行っています。

**刊行事業**では、会員の情報交換や啓発・教育を目的として、会報「まてりあ」を毎月刊行し、会員に配布しています。また、和文の学術論文誌「日本金属学会誌」および、材料系14学協会と共同刊行している英文の学術論文誌「Materials Transactions」を毎月刊行して、研究成果を国内外に広く発信しています。「日本金属学会誌」では年間約80編の論文を、「Materials Transactions」では年間約300編の論文を掲載しています。さらに、金属及び関連材料に関する専門書や学生向けの教科書類等の「学術図書類」を刊行しています。

**講演会・講習会事業**では、最新の研究成果を発表・討議するとともに、会員間の交流を図ることを目的として、春秋2回の「講演大会」を開催しています。講演大会は約900件の講演があり、約1400名が参加しています。会場では企業の最新の技術を紹介する「機器展示」や「ランチョンセミナー」も実施しています。また、春期講演大会では、卓越した業績を挙げた者による「本多記念講演」や、学生の進路選択と企業の採用を支援することを目的とした「企業説明会」を開催しています。さらに、専門知識の普及や啓発、教育を目的として「セミナー・シンポジウム」や講習会を開催しています。また、国際会議もこれまでに25件を本会主催で開催して

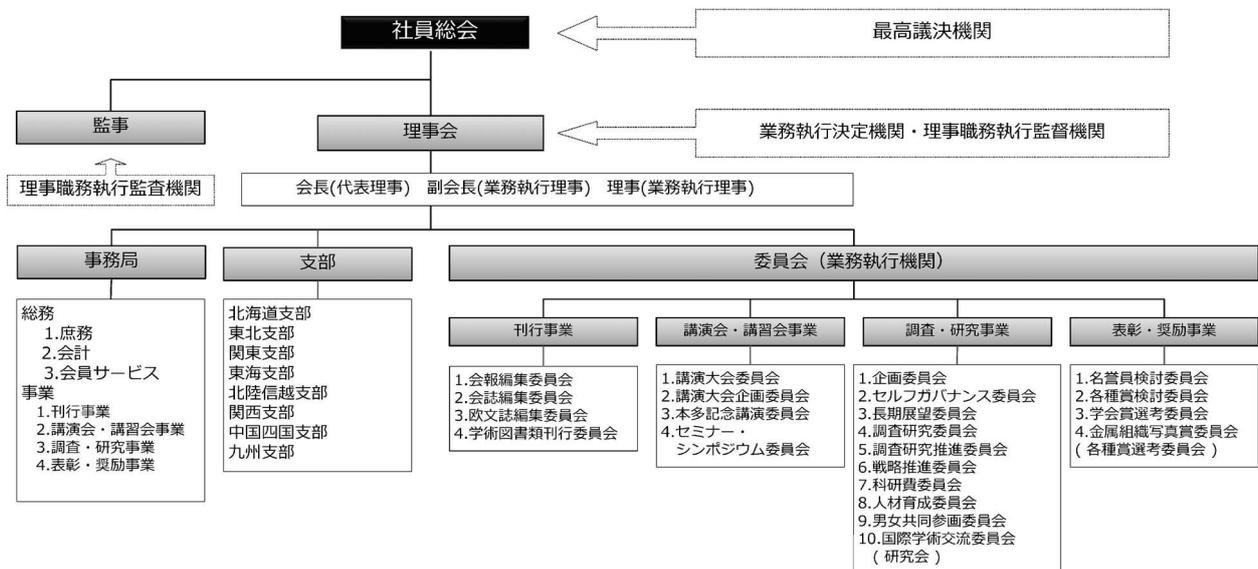
ます。

**調査・研究事業**では、重要な企画、統治、長期展望に関する「企画委員会」、「セルフガバナンス委員会」、「長期展望委員会」が設置されています。また、関連が深い専門分野の研究者や技術者が集う6つの分科で構成された「調査研究委員会」の活動を推進しており、先端領域や学際的領域の研究課題に対する研究を促進する目的で「研究会」が設置されて活動しています。さらに、「戦略推進委員会」や「科研費委員会」では、金属及びその関連材料分野の学術及び科学技術の振興に向けた材料戦略活動を行なっています。一方、「人材育成委員会」では、次世代を担う人材を育成することを目的として、「出前講義」や「高校生向けホームページ」等の活動を行なっています。「男女共同参画委員会」では、女性の社会進出を支援するために、男女共同参画学協会連絡会との連携や鉄鋼協会合同男女共同参画委員会活動を実施しています。また、国外の学術団体との交流を推進している「国際学術交流委員会」では、World Materials Day Awardの授賞をはじめ、米国TMSとの講演大会へ研究者の相互派遣、韓国KIMとの共同シンポジウム開催等を実施しています。

**表彰・奨励事業**では、「名誉員」や「学会賞」を始めとして、優れた研究や技術開発の成果を上げた者や当該分野の発展に寄与した者の表彰や今後の貢献が期待される者の奨励を目的とした「各種賞」で、毎年20件の表彰・奨励を行っています。さらに、昨年「日本金属学会フェロー」を設けました。

**全国の8支部**も活発に活動しており、各支部で独自に講演会・講習会（講演大会、本多光太郎記念講演会、セミナー、談話会）、研究会、見学会などを実施しています。

日本金属学会は21世紀の日本を背負って立つ研究者や技術者の入会を大いに歓迎いたします。会報「まてりあ」は、会員のみを提供されます。さらに、会員には、講演大会への会員参加費での参加及び登壇費の免除、刊行物の会員価格での購入、本会主催のセミナー・シンポジウム・講演発表会等への会員割引価格の参加等の特典があります。



# 連載「金属素描」「金属なんでもランキング」について

編集チーム 竹田 修\* 森戸春彦\*\* 榎木勝徳\*\*\*  
安達正芳\*\*\* 齊藤敬高\*\*\*\*

金属元素は、定義にもよるが、地球環境下で安定に存在するもので60以上もある。しかし、日本金属学会は、金属材料に関してありとあらゆる分野を網羅する広範な研究者で構成されており、これまで研究対象になったことのない金属は無いと信ずる。一方で、特定の金属について詳しい専門家は多数いるが、専門が多岐に渡るがゆえに、「金属」というものの全体像が見えにくくなっていることも感じる。

そこで、「金属素描」および「金属なんでもランキング」と題した連載を企画した。前者は、毎回、一つずつ金属を選び、その物理的・化学的特徴、製法、用途等について紹介するものである。元素の百科事典については、古くから様々な専門家が執筆しているが<sup>(1)</sup>、化学物質としての顔を描いたものが多く、金属材料を研究する学問体系の視点から書かれたものは少ない<sup>(2)</sup>。意外に知らない事実だけでなく、本会の会員諸氏が読んで楽しく、かつ、具体的に役立つ情報を纏めたいと考えている。合わせて、様々な形態の金属の写真を掲載するのでお楽しみ頂きたい。一方で、後者は、物性等、金属にまつわる様々な数値<sup>(3)</sup>をグラフにして「見える化」する。特に、金属全体に渡ってデータを整理することによって、全体像を明瞭にしたい。これらの連載を通して、学生諸君や初学者に対しては、金属の多様な姿に接することによって、金属の本質を考えるきっかけを提供したい。また、シニアの研究者に対しては、金属の全体像を再度俯瞰して頂くことで、新たな視点を獲得して頂きたい。

第1弾として、2年ほどに渡って交互に連載をお届けする。各記事は、それぞれの金属元素を実際に取り扱い、その性質を知り尽くした新進気鋭の研究者の先生方にご執筆頂いた。多忙の中、ご執筆頂いた著者の皆様方、写真をご提供くださった皆様方に篤くお礼を申し上げる。

最後に、本連載において誤りや誤解等があったとしたら、それは私ども編集チームの責任である。ご意見、ご批判は真摯に受け止め、連載をより良いものにしてゆく所存であるので、忌憚なくご意見、質問等をお寄せいただきたい。

それでは、金属が多彩な姿で活躍する劇が幕を開ける。ぜひともお楽しみ頂きたい。

## 文 献

- (1) 例えば、John Emsley 著：山崎昶訳、「元素の百科事典」、丸善(2003)。
- (2) 例えば、ウォーク著：増本健監修、「金属なんでも小事典」、講談社(1997)。
- (3) 日本金属学会編：「金属データブック第4版」、丸善。



竹田 修



森戸春彦



榎木勝徳



安達正芳



齊藤敬高

\* 東北大学大学院工学研究科；准教授

\*\* 東北大学金属材料研究所；准教授

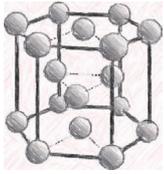
\*\*\* 東北大学多元物質科学研究所；助教

\*\*\*\* 九州大学大学院工学研究院；准教授

“Sketch of Metals”, “Rankings of Metals”; Osamu Takeda\*, Haruhiko Morito\*\*, Katsunori Enoki\*\*\*, Masayoshi Adachi\*\*\* and Noritaka Saito\*\*\*\* (\*Graduate School of Engineering, Tohoku University, Sendai. \*\*Institute for Materials Research, Tohoku University, Sendai. \*\*\*Institute of Multidisciplinary Research for Advanced Materials, Tohoku University, Sendai. \*\*\*\*Institute of Multidisciplinary Research for Advanced Materials, Tohoku University, Sendai. \*\*\*\*Graduate School of Engineering, Kyushu University, Fukuoka)

Keywords: *metal, physical and chemical properties, application, ranking*

2018年10月20日受理[doi:10.2320/materia.58.4]



シリーズ「金属素描」

# No. 1 チタン (Titanium)

東北大学 上田 恭介



元素名：Titanium，原子番号：22，質量数：47.87，電子配置：[Ar]3d<sup>2</sup> 4s<sup>2</sup>，密度：4.508 Mg·m<sup>-3</sup>(298 K)，結晶構造： $\alpha$ -Ti 六方晶 (~1156 K)， $\beta$ -Ti 立方晶 (1156~1953 K)，融点：1953 K，沸点：3535 K，地殻存在量 0.7 mass%-TiO<sub>2</sub>【写真】(a)クロール法により得られたスポンジチタン(日本金属学会 写真提供)，(b)TiCl<sub>4</sub> 蒸気を Mg 蒸気で還元して得られたチタン(東北大学金属材料研究所 写真提供，参照：竹内ら，日本金属学会誌，23(1959)，629-633.)

チタンは構造用金属材料の中で最も比強度が高く，白金に匹敵する優れた耐食性および細胞毒性やアレルギー性を示さない生体安全性を示すことから，wonder metal とも呼ばれる夢のような材料である．加えて，チタンは地殻中存在量が 9 番目に多く，金属元素の中ではアルミニウム，鉄，マグネシウムに次ぐ 4 番目と，自然界に豊富に存在している．それにも関わらず，チタンはレアメタルに分類されており，2015年におけるスポンジチタンの世界生産量は180,000トン<sup>(1)</sup>と粗鋼の約 1/10<sup>4</sup> であり，それこそ桁違いに少ない．これはひとえに製錬が困難であり，高コストであるためである．チタンの歴史は浅く，1910年にハンター(Matthew A. Hunter)が TiCl<sub>4</sub> をナトリウムで還元する(ハンター法)ことで99.9%の金属チタンを得ることに成功している．その後1938年にはクロール(Wilhelm J. Kroll)が TiCl<sub>4</sub> をマグネシウムで還元する(クロール法)プロセスを確立し，量産可能となってからまだ80年しか経っていない．現在でもその製錬原理は変わらず，チタンはほぼ全てがクロール法により製錬され，写真(a)に示すスポンジチタンを得ている．このスポンジチタンを真空アーク溶解，真空電子ビーム溶解，プラズマアーク溶解により溶解し，インゴットを得る．

さて，チタンの優れた耐食性や生体安全性，製錬が困難であるといった特徴は，全て酸素が関与している．チタンの酸素溶解度は約14 mass% (33 at%)と広い固溶域を有している．そのため，合金溶解時の酸素ゲッターや脱酸剤として使用されており，このような用途でチタンに触れている読者も多いと思う．酸素のみならず，他の元素との溶解度も高いことから，チタンは合金設計の自由度が高く，特に酸素，炭素，窒素といった軽元素を合金元素として活用できるといっ

た特徴を有している．さらに，他の元素との親和力も高いことから，例えば酸素であれば容易に保護性の TiO<sub>2</sub> を表面に形成する．そのため，高い耐食性を示すのである．興味深いことに，チタンは生体必須元素ではない．これは前述のとおり TiO<sub>2</sub> が安定であるため，植物も含めて生体内にイオンとして存在し得ない，すなわち食物を通じた摂取が無いため，生体内に取り込まれることが無かったことに起因する．そのため，細胞毒性やアレルギー性を示さないことから，現在では生体埋入デバイスの素材として使用されている．特に人工関節や人工歯根といった骨との強固な結合が求められるデバイスに使用されているが，これは，金属材料の中で唯一，チタンが生体内において骨と光学顕微鏡レベルで結合する「オッセオインテグレーション」<sup>(2)</sup>を有しているためである．チタンには $\alpha$ 型， $\beta$ 型， $\alpha+\beta$ 型等の多彩な合金群が存在し，それぞれ強度，延性，高温特性が異なる．加えて，NiTiは代表的な超弾性，形状記憶特性を有する合金であり，様々な分野で実用化されている．

今後，製錬まで含めた低コスト化によりチタンが普及すれば，世界は劇的に変わることは間違いない．我々チタン研究者は，そのような劇的な社会変化を夢見て，日々研究開発に勤しんでいる．

## 文 献

- (1) 山出善章ら：軽金属，67(2017)，126-135.
- (2) P.-I. Branemark *et al.*: Scand. J. Plast. Reconstr. Surg. Suppl., 11(1977)，1-132.

次号 金属元素なんでもランキング! No. 1 地殻存在量



JFE

# 挑戦・柔軟・誠実 JFE スチール

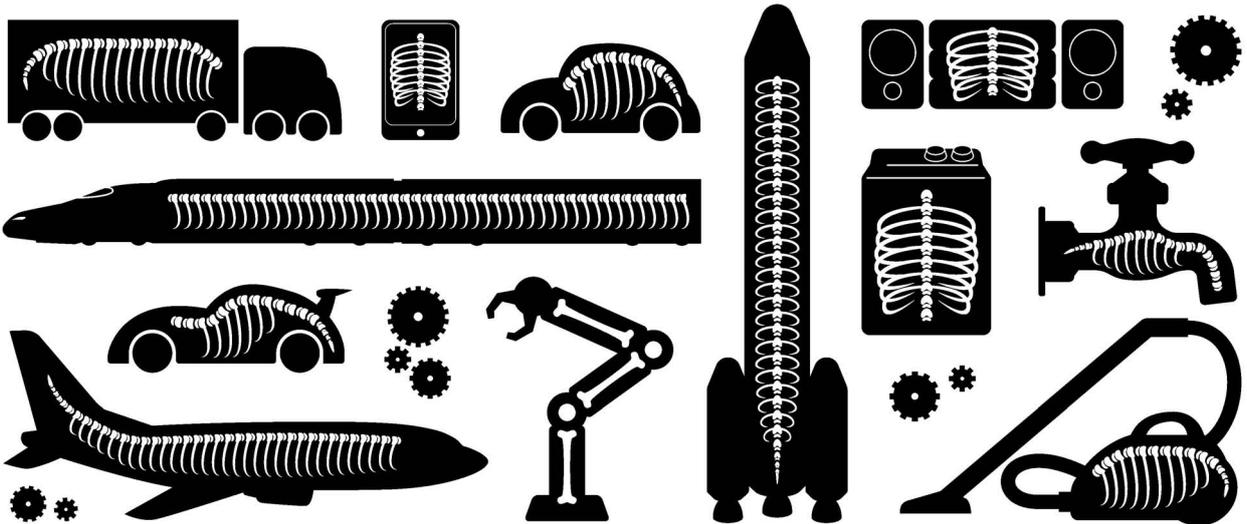


JFE スチールは、  
常に世界最高の技術をもって  
社会に貢献します。

JFE スチール 株式会社 〒100-0011 東京都千代田区内幸町2丁目2番3号(日比谷国際ビル) TEL 03(3597)3111 URL <http://www.jfe-steel.co.jp/>

DAIDO STEEL GROUP  
Beyond the Special

外からは見えませんが、骨のある会社です。



多彩なフィールドで、フロンティアを目指しています。

大同特殊鋼の素材は、暮らしや産業を支える多彩な製品や部品に使われています。  
私たちはこれからも、素材の力で新たな価値創造に貢献していきます。

★ 大同特殊鋼



世界の  
当たり前を  
つくる。



新日鐵住金

2019年4月 日本製鉄へ





# 能動学習の基礎と材料工学への適用例

日野 英逸\* 田口 優介\*\*  
上野 哲朗\*\*\* 小野 寛太\*\*\*\*

## 1. はじめに

材料の科学的性質を研究し、その工学的な応用及び所望の性質を有する材料の開発を目的とする材料科学は、材料の計測及び試作の繰り返しを伴う。この観点からすると、材料科学の研究プロセスはモデルの構築と評価を繰り返すデータ解析や機械学習と共通点があるといえよう。機械学習の代表的な問題設定である教師付き学習は、予め大量の入力データと出力データの組が与えられた状況で入出力の対応関係を近似する問題である。モデルの構築に利用できる入出力データの数があれば増えるほどより正確な入出力関係の近似が可能となるが、入力に対して適切な出力を得るために大きなコストがかかることがある。例えば、農作物を育成する環境(各月の平均気温、投与する肥料の種類と量、気象状況等)を「入力」として、特定の農作物の性質(糖度等)を「出力」とすると、ある特定の入力に対して出力を得るためには数ヶ月から数年単位での時間がかかるであろう。また、後述するX線スペクトル計測実験を行う放射光実験施設では研究者が設備を利用できる時間は非常に限られている。入力に対応する実験設定や計測設定として「このような計測を行う」という計画を立てることは可能であるが、対応する出力を得るためのコストが高く、可能な限り少数の計測で最大限の情報を引き出す工夫が必要である。実験を実施する前に説明変数の種類と説明変数の値、そして必要な計測の回数を入念に設計する技術として、実験計画法と呼ばれる方法論がある<sup>(1)</sup>。一方、既にある程度の量のデータ(入出力の組)を観測しており、それを用いて予測モデルが作られているとき、次にどの入力に対して出力の値を取得して、そのデータをモデルの構築に用いるとよりよい予測が出来るようになるかを議論し、自動的に「次の一手」を打つための方法論が能動学習である。能動学習によって予測器を学習するために利用する例題(サンプル)を適切に選択することで、未知の説明変数に対する

応答変数の予測を誤る確率(汎化誤差)が低減することが理論的にも知られている<sup>(2)</sup>。なお、能動学習と非常によく似た方法論としてベイズ最適化がある。ベイズ最適化では、最大化あるいは最小化したい評価関数があり、その評価関数を最大にするような入力を可能な限り少ない試行で見つけることを目的としている。一方、能動学習では最小限のサンプル(入出力の組)を用いて入出力関係を学習することを目的とする。本稿では、まず能動学習の問題設定と代表的なアプローチを簡単に説明する。次に、具体的な材料科学への適用例として、X線磁気円二色性スペクトル測定による物質の磁気モーメントの定量解析を能動学習的な手法によって効率化した例を紹介する。

## 2. 記法の準備

以下では、統計学において入力から出力を予測するといった問題を考える際に標準的に用いられる回帰分析の用語を採用し、入力を説明変数  $x$ 、出力を応答変数  $y$  と呼び、 $x$  から  $y$  を予測する予測器  $f(x)$  を学習する問題を考えることにする。 $x, y$  が取りうる値の範囲をそれぞれ  $X, Y$  とする。 $Y$  が離散個の要素を持つ場合には、 $x$  から  $y$  を予測する問題は判別問題と呼ばれ、 $Y$  が連続的な実数値を取る場合にはこの問題は回帰問題と呼ばれる。予測器によって説明変数  $x$  に対応して予測された応答変数の予測値を  $\hat{y}=f(x)$  と表す。予測器に付随して、説明変数  $x$  を固定したときに応答変数  $y$  が取りうる値の確率(事後確率と呼ぶ)  $\Pr(y|x)$  あるいは事後確率密度  $p(y|x)$  も得られるものとする。これは予測をするときに応答変数  $y$  の値を一つ確定的に出力するのではなく、取りうる様々な  $y$  の値に「確信度」を与えることに相当し、機械学習においてこうした出力が可能な予測器は良く用いられる。確率変数を大文字  $X$  で表し、その実現値を小文字  $x$  で表すものとする。確率関数を  $\Pr(X=x)$  のように確率変数  $X$  が値  $x$  をとる確率を与える関数として定義し、確率密度関数を  $p(x)$

\* 統計数理研究所; 准教授(〒190-8562 東京都立川市緑町10-3)

\*\* 筑波大学; 大学院博士前期課程 \*\*\* 量子科学技術研究開発機構; 主任研究員

\*\*\*\* 高エネルギー加速器研究機構; 准教授

Introduction to Active Learning and Application to Material Engineering; Hideitsu Hino\*, Yusuke Taguchi\*\*, Tetsuro Ueno\*\*\* and Kanta Ono\*\*\*\* (\*The Institute of Statistical Mathematics, Tokyo. \*\*University of Tsukuba, Tsukuba. \*\*\*National Institutes for Quantum and Radiological Science and Technology, Hyogo. \*\*\*\*High Energy Accelerator Research Organization, Tsukuba)

Keywords: active learning, Gaussian process, material informatics, classification, regression, machine learning

2018年8月20日受理[doi:10.2320/materia.58.7]

で表す. 代表的な確率密度関数として, 平均ベクトル  $\mu$ , 分散共分散行列  $\Sigma$  を持つ多変量 ( $d$  次元) ガウス分布の確率密度関数は

$$p(x; \mu, \Sigma) = (2\pi)^{-d/2} \sqrt{|\Sigma^{-1}|} \exp\left(-\frac{1}{2}(x-\mu)^\top \Sigma^{-1}(x-\mu)\right)$$

で定義される. ここで正方行列  $A$  に対して  $|A|$  でその行列式を表すものとする. 予測器あるいは事後確率は, パラメタ  $\theta$  を有しており, このパラメタをうまく調整することで「学習」を行うものとする. パラメタを明示するために  $f_\theta(x)$ ,  $\Pr_\theta(y|x)$  あるいは  $f(x; \theta)$ ,  $\Pr(y|x; \theta)$  のように書くことがある. 多くの場合, 予測器のパラメタは  $n$  個の学習データ  $D = \{(x_i, y_i)\}_{i=1}^n$  に関して, 予測の損失関数と呼ばれる関数  $l_\theta(x, y)$  の総和  $l_\theta(D) = \sum_{i=1}^n l_\theta(x_i, y_i)$  を最小にすることで行われる. 例えば損失関数としては二乗損失  $(y-f(x))^2$  がよく利用され, この場合の最適なパラメタは

$$\hat{\theta} = \operatorname{argmin}_\theta \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - f(x_i; \theta))^2$$

として得られる. ここで  $\operatorname{argmin}_\theta$  とは, その後に続く目的関数を最小にするようなパラメタ  $\theta$  を返す操作である. こうして得られたパラメタで指定される予測器あるいは事後確率を, 将来得られる説明変数に対応する応答変数の予測に用いる. なお, 特にパラメタを問題としない場合は  $\theta$  を省略することもある. 新たに応答変数の値を計測する対象の説明変数の実現値のことをクエリと呼ぶことにする. このクエリ(問い合わせ)に対して, 実際に実験等を行って応答変数の値を確定させることが計測という操作に対応する. クエリに対応する応答変数の値を定めることを, 機械学習の用語を採用して「ラベルを付ける」と表現する.

### 3. クエリ選択の指針

能動学習を行う際, 発行するクエリの選択基準にも様々な考え方がある. 紙幅の都合から, 代表的かつ直感的に理解しやすい3つの考え方を紹介する. 全ての能動学習のシナリオには, 各データの情報量尺度の評価が含まれる. そのようなクエリ戦略の手法は数多く提案されている. ここで,  $x_A^*$  はアルゴリズム  $A$  によって選択された最適なデータとする. 以下の分類は, 主に(3)に従う.

#### (1) 不確実性サンプリング

手元に学習した予測モデル  $f(x)$  とそれを用いた条件付き確率  $\Pr(\hat{y}|x)$  の計算手段があるとして, 最も予測の自信が無いようなサンプルに対してラベル付けを要求することは直観的にも自然であろう. 自信のなさ, すなわち不確実性を定量化する方法は色々と考えられるが, 代表的な尺度の一つがエントロピー<sup>†1</sup>である.

$$x_{\text{H}}^* = \operatorname{argmax}_x -\mathbb{E}[\log \Pr(Y|x)]$$

ここで  $\mathbb{E}$  は条件付き分布  $\Pr(y|x)$  に関する期待値を取る操作であり,  $y$  が離散個の値を取る場合には  $x_{\text{H}}^* = \operatorname{argmax}_x -$

$\sum_{y \in Y} \Pr(y|x) \log \Pr(y|x)$  で,  $y$  が連続値の場合には  $x_{\text{H}}^* = \operatorname{argmax}_x - \int_{y \in Y} p(y|x) \log p(y|x) dy$  である. エントロピー基準は, エントロピーが尤度<sup>†2</sup>の期待値の負であることから, 尤度が小さいと期待されるサンプルにラベルをつけることになり, モデルにとって予測に自信がないデータを積極的に学習に取り入れることになる. 自信がない分野の勉強を重点的に行うというイメージであり, 我々人間が行う「学習」とも共通しているであろう. 同じ考え方に基づくより簡便な方法としては,

$$x_{\text{LG}}^* = \operatorname{argmin}_x \Pr(\hat{y}|x)$$

によってクエリを選択する方法がある. ここで  $\hat{y} = \operatorname{argmax}_y \Pr_\theta(y|x)$  は現在の予測器で応答変数を予測するという状況で, 最も事後確率が高い応答変数値を表す. すなわち, 現状の予測器にとって最も確信度が低く, 予測が正しいかどうか自信が無いようなサンプル  $x$  に対してラベル  $y$  を付与してもらう.

#### (2) 期待モデル変化

不確実性サンプリングでは説明変数を観測したときの応答変数に関する曖昧さに基づきクエリを選択した. 別なアイデアとして, ラベル(応答変数値)が得られ, それを学習サンプルに取り入れてモデルを学習した場合に, 最も現在のモデルを大きく変えるようなサンプル(説明変数値)をクエリとして選択することも自然であろう. この方針を, 期待モデル変化と呼ぶ. これはモデルの変化を定量的に評価できるようなモデルにならば適用可能なアプローチであり, 多くの場合モデルの変化を, 新しいサンプル  $(x, y)$  を加えたときの, 学習の目的関数の勾配の絶対値  $\|\nabla l_\theta(D \cup (x, y))\|_2$  で表す. 実際には真のラベル  $y$  はわからないので, 現在得られている事後分布に関する期待値をとって

$$x_{\text{EMC}}^* = \operatorname{argmax}_x \sum_j \Pr(y_j|x) \|\nabla l_\theta(D \cup (x, y_j))\|_2$$

とする. 応答変数が連続値の回帰問題においては上式の和を積分に置き換える. このアプローチは, 「これまでの考え方を大きく変えるような出来事を積極的に学ぶ」という態度といえる.

#### (3) 分散最小化

予測器の学習は, 通常は何らかの損失関数  $l_\theta(D)$  の最小化で行う. 損失関数を最小にするようなサンプルを直接選択するアプローチも考えられるが, 実用上難しいことが多い. 一方, 例えば連続応答変数を扱う回帰問題において一般的に取られる二乗損失最小化基準では, データ  $(x, y)$  の分布に関する

†1 (情報)エントロピー  
確率分布に付随する不確かさの尺度.

†2 尤度  
あるパラメタに従ってデータが生成されるとした場合, 観察結果からみてパラメタの値の尤もらしさ(もっともらしさ)を表す数値のこと.

る二乗損失の期待値に関して次のような関係が成り立つことを示すことが出来る：

$$\text{「二乗損失の期待値」} = \text{「誤差の分散」} + \text{「予測のデータへの当てはまりの悪さ」} + \text{「予測器のパラツキ」}$$

ここで、右辺第一項の誤差の分散は予測器に依存しない部分であり、コントロールは出来ない。また、第二項についても、利用する予測器の種類を一度定めたら自動的に決まるものである。最後の予測器のパラツキは数式では  $\mathbb{E}_D[(\hat{y} - \mathbb{E}_D[\hat{y}])^2]$  で与えられる予測結果  $\hat{y} = f_\theta(x)$  の分散であり、これは予測器をうまく調整する、あるいは学習サンプルをうまく選択することで減少させることが出来る量である。なお、 $\mathbb{E}_D[\hat{y}]$  は既に得られた学習データ  $D$  の分布に関する期待値を意味する。

### 3. 応 用 例

#### (1) 格子構造の分類

まず、上述の不確実性サンプリングに基づく方法でランダムサンプリングよりも効率的にクエリを選択できることを見てみよう。無機材料の X 線回折パターン(ピーク位置)を説明変数として、鉄鋼の格子構造が面心立方格子構造(fcc)であるか体心立方格子構造(bcc)であるかを判別する 2 クラス分類問題を考えよう。bcc, fcc のそれぞれの構造に対応した X 線回折パターンを 30889 件 (fcc 24936 件, bcc 5953 件) 準備した。予め 1000 件 (fcc, bcc 各 500 件) をテストデータとして、残りの 30389 件を学習データ候補とした。前処理として主成分分析により説明変数を 3 次元まで削減してから、ロジスティック回帰<sup>(4)</sup>によって説明変数に対応する応答変数が fcc あるいは bcc のどちらであるかを確率的に予測する予測器を構築して、テストデータを用いてその予測精度を評価する。

実験設定と結果の紹介に入る前に、確率値を出力できる判別器の構成方法の代表例として、ロジスティック回帰を紹介する。なお、「回帰」という名称ではあるが、ロジスティック回帰は判別問題のためのモデルであることに注意されたい。

#### (2) ロジスティック回帰

2 クラス判別問題を考えるため、応答変数  $y$  は 0 か 1 の 2 値を取るものとする。線形回帰において、説明変数  $\mathbf{x}$  を観測した時の応答変数  $y$  の条件付き分布を  $p(y|\mathbf{x}) = p(y - \mathbf{w}^T \mathbf{x} | \mathbf{w})$  としてモデル化したのと同様に、判別問題では応答変数  $y$  の、 $\mathbf{x}$  を観測したときの条件付き確率を  $\Pr(y=1|\mathbf{x})$  をモデル化する。簡単のため、 $p = \Pr(y=1|\mathbf{x})$  とおく。この  $p$  の関数として、ロジット関数を次式で定義する：

$$\text{logit}(p) = \log \frac{p}{1-p}$$

これは (0, 1) の間の値を定義域とし、実数の全範囲を値域とする関数である。説明変数  $\mathbf{x}$  の値と  $\text{logit}(\Pr(y=1|\mathbf{x}))$  の間に線形な関係

$$\text{logit}(\Pr(y=1|\mathbf{x})) = \mathbf{w}^T \mathbf{x}$$

を仮定する。簡単な計算により、

$$\Pr(y=1|\mathbf{x}) = \frac{1}{1 + e^{-\mathbf{w}^T \mathbf{x}}}$$

となることが確認できる。上式右辺はロジスティック関数と呼ばれる。観測データ  $D = \{(y_i, \mathbf{x}_i)\}_{i=1}^n$  に含まれる個々のサンプル  $(y_i, \mathbf{x}_i)$  において、応答変数  $y_i$  が 1 か 0 かのいずれかなので  $\Pr(y=0|\mathbf{x}) = 1 - \Pr(y=1|\mathbf{x})$  に注意すると、このモデルにおいて尤度関数は

$$\begin{aligned} l(\mathbf{w}) &= \prod_{(y_i, \mathbf{x}_i) \in D} \Pr(y_i|\mathbf{x}_i) \\ &= \prod_{(y_i, \mathbf{x}_i) \in D} \left( \frac{1}{1 + e^{-\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i}} \right)^{y_i} \left( \frac{e^{-\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i}}{1 + e^{-\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i}} \right)^{1-y_i} \end{aligned}$$

となり、対数尤度関数は

$$L(\mathbf{w}) = \sum_{(y_i, \mathbf{x}_i) \in D} \left( y_i \log \frac{1}{1 + e^{-\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i}} + (1 - y_i) \log \frac{e^{-\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i}}{1 + e^{-\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i}} \right)$$

となる。対数尤度関数  $L(\mathbf{w})$  を係数  $\mathbf{w}$  に関して最大化することで、最尤推定による係数  $\mathbf{w}$  の推定値  $\hat{\mathbf{w}}$  が得られる。通常の線形回帰とは異なり閉じた形の解は存在しないため、対数尤度関数の最大化はニュートン法などの数値最適化手法を用いる。

新たに観測した説明変数  $\mathbf{x}$  に対して、

$$\Pr(y=1|\mathbf{x}) = \frac{1}{1 + e^{-\hat{\mathbf{w}}^T \mathbf{x}}}$$

によって対応する応答変数が取る値が 1 である確率が得られるので、例えばこの確率が 0.5 以上の時には  $\mathbf{x}$  に対応する  $y$  は 1 であるとして、0.5 未満の場合には 0 であるとして、新しい観測が 2 つのクラスのいずれに属するかを判別することが出来る。

#### (3) 実験設定と結果

能動学習の設定として、初期予測モデルを fcc, bcc それぞれ 25 件のサンプルを用いて学習した後、エントロピー基準による不確実性サンプリングによって、学習データ候補の中で未使用のサンプルを一つ追加して予測器を学習しなおすことを 100 回行った。また、比較対象としてランダムにサンプルを一つ一つ追加して予測器を学習する実験も行った。図 1 は、テストデータの選択と初期モデルの学習データの選択、及びランダムにサンプルを選択する際の乱数を変化させて 20 回同じ実験を繰り返したときの、予測器の学習に用いたデータ数(横軸)と平均予測誤差の平均をプロットしたものである。実線が能動学習を用いて学習した予測器による予測誤差、点線がランダムにサンプルを選択して学習した予測器による予測誤差である。学習の初期段階(追加するサンプルが 30 件程度まで)では、能動学習によって選択されたサンプルを追加することで予測精度が劣化している。これは、少数個のデータを用いて構築した予測器ではクラス事後確率が正しく学習出来ていないため、それに基づいて選択した追加学習サンプルが予測器の性能向上に寄与していないという事情であると考えられる。一方、ある程度予測器の学習が進んだ後

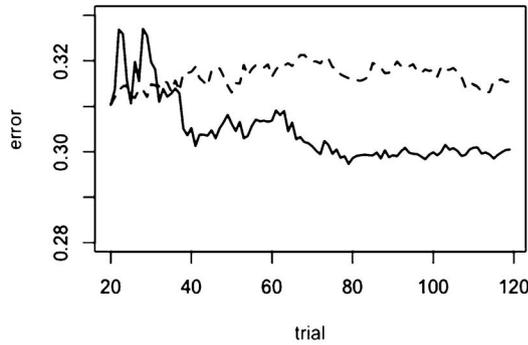


図1 能動的サンプリングに伴うテスト誤差の低減.

は、能動的に学習サンプルを選択することでランダム選択と比較して効率的に予測精度を向上させることに成功している。

#### (4) X線スペクトル測定の高効率化

X線スペクトル測定は試料にX線を照射し、試料から放出されるX線や電子のエネルギー分布(X線スペクトル)を調べる実験手法である。X線スペクトル測定にはさまざまな種類があるが、特にX線磁気円二色性スペクトル測定に着目する。X線磁気円二色性スペクトル測定では物質の磁気的な情報を調べることができ、永久磁石材料やスピントロニクス材料の研究に欠かせない実験手法のひとつである。近年、研究開発サイクルが加速するなかで、迅速に実験データを取得・解析し、物質・材料開発にフィードバックすることが求められている。X線磁気円二色性スペクトル測定も例外ではなく、これまでよりも測定のスループットを上げる必要がある。X線磁気円二色性スペクトル測定ではエネルギーを細かく変えながらX線を試料に照射して、対応するスペクトルを求める。X線磁気円二色性スペクトルでは「磁気光学総和則」が知られており、スペクトルの積分強度からスピン磁気モーメントと軌道磁気モーメントを定量解析することができる。従来の測定では、どの程度細かく測定するか、あるいは測定点数を何点にするかなどを予め実験者が決めていた。実験データの品質にこだわるあまり、必要以上に測定点数を多くして、貴重な実験時間を無駄に費やす可能性もある。そこで、能動学習を用いて適応的に次にどのエネルギーで測定を行うかを定め、実験者に依らず必要十分な実験データを効率的に取得する方法を考える。これによりこれまでと同等の情報を得るために必要な計測点数を削減することができて、測定時間そのものを短縮することができるようになる。ここで計測点数を合理的に減らすために「ガウス過程回帰<sup>(5)</sup>」を用いる。

#### (5) ガウス過程回帰

通常の変量ガウス分布は、平均ベクトル $\mu$ と分散共分散行列 $\Sigma$ によって定まる分布であった。一方、ガウス過程はベクトルではなく関数が従う確率分布の一つであり、平均関数 $m(x)$ と共分散関数 $k(x, x')$ によって指定される。少し数学的な厳密さには欠けるが、関数が従う確率分布について

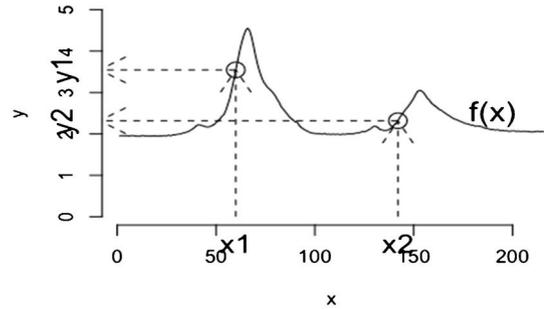


図2 多次元正規分布とガウス過程.

直観的な理解を目的として説明をしよう。

図2では、 $xy$ 平面上に関数 $y=f(x)$ がプロットされている。適当な2点 $x_1, x_2$ に対応する $y_1=f(x_1), y_2=f(x_2)$ を考える。ここで、二次元ベクトル確率変数 $(Y_1, Y_2)$ が平均ベクトル $(y_1, y_2)$ 、分散共分散行列 $\Sigma_{1,2}$ で定まる正規分布に従っていると仮定しよう。このようにして、 $x$ 軸から $d$ 個の点を指定することで $d$ 個の対応する $y$ 軸上の点が定まり、それを $d$ 次元ベクトルとみなす、そしてさらに $d$ 次元正規分布に従う確率変数ベクトルとみなす、という操作を考える。図では2点のみであった $x$ 軸上からのサンプルを、無限に細かくとり、最終的には $x$ 軸のすべての値を $y$ 軸に $f(x)$ で対応させることで、ベクトルから関数へ考察の対象を拡張することが出来る。そして、確率変数ベクトルを考えたのと同様に、確率的な振る舞いをする関数を考えることも出来る。この、確率変数である関数 $f(x)$ がガウス過程であるとは、任意の個数の点 $x_1, x_2, \dots, x_n$ における $n$ 次元確率変数ベクトル $(f(x_1), f(x_2), \dots, f(x_n))^T$ が正規分布に従うときをいう。通常正規分布が平均と分散によって定まると同様に、ガウス過程は平均関数 $m(x) = \mathbb{E}[f(x)]$ 及び、二点 $x, x'$ の共分散を定義する共分散関数 $k(x, x') = \mathbb{E}[(f(x) - m(x))(f(x') - m(x'))]$ を指定することで定まる。このようにして確率的に振る舞う関数考えたとき、その最も基本的なものがガウス過程である。実際には観測した点や観測候補となる点を指定して得られる多次元正規分布を扱うことになるので、正規分布の基本的な性質を理解していれば問題ない。ここで必要となる正規分布の性質は、 $(\mathbf{x}, y)^T$ が平均 $(\mu_x, \mu_y)^T$ 、分散共分散行列 $\begin{pmatrix} A & \mathbf{c} \\ \mathbf{c}^T & b \end{pmatrix}$ に対して、 $\mathbf{x}$ で条件づけた $y$ の確率分布がやはり正規分布になり、その平均が $\mu_y + \mathbf{c}^T A^{-1}(\mathbf{x} - \mu_x)$ 、分散共分散行列が $b - \mathbf{c}^T A^{-1} \mathbf{c}$ になるという事実である<sup>(5)</sup>。この事実を用いて、はじめに $\{(x_i, y_i)\}_{i=1}^n$ として $n$ 点での計測が得られている状況で新たに $x_{\text{new}}$ という点を計測するとした場合、 $\mathbf{f} = \mathbf{y} = (y_1, \dots, y_n)^T$ と $y_{\text{new}}$ の同時分布は、はじめは平均関数を0としておくと

$$\begin{pmatrix} \mathbf{y} \\ y_{\text{new}} \end{pmatrix} \sim N \left( \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{bmatrix} K & \mathbf{k}_{n, \text{new}} \\ \mathbf{k}_{n, \text{new}}^T & k_{\text{new}} \end{bmatrix} \right)$$

である。ここで、 $K \in \mathbb{R}^{n \times n}$ は予め観測されている $n$ 個のデータで評価した $n \times n$ の分散共分散行列であり、 $\mathbf{k}_{n, \text{new}}$ は各



# ベイズ最適化の基礎と材料工学への応用

松井孝太\* 金森研太\*\*  
豊浦和明\*\*\* 竹内一郎\*\*\*\*

## 1. はじめに

「設計」や「計画」は、あらゆる科学的営みと切り離すことができない重要な問題の1つである。例えば、新たな科学的知見を得るために実験計画を立てる、あるタスクをより効率的に解決するためのロボットを設計する、疾患に有効な薬剤を設計する、天然資源を利用するための探鉱計画を立てる、というように、設計や計画が問題の根幹となっている例は枚挙に暇がない。近年、設計・計画問題に対するデータ駆動型アプローチ、また、それを実現するための情報技術である機械学習が注目されている。データ駆動型アプローチは、データ分析の方法だけでなくデータ収集の方法も考察の対象とする。特に後者の特性は、ものづくりなどデータ収集コストが非常に高い分野においては重要な意味を持つ。本稿では、データ収集と分析を統合的に扱うデータ駆動型アプローチの1つであるベイズ最適化<sup>(1)</sup>に注目し、その基本的なアイデアを解説し、材料工学分野での研究を紹介する。

## 2. ベイズ最適化の基本概念

ある実験条件を入力  $x$  とし、その条件の下での実験結果を観測  $y$  としたとき、 $x$  と  $y$  の間の関係  $f$  は実験そのものであり、数学的に陽に書き下すことができない。このような  $f$  をブラックボックス関数と呼び、ベイズ最適化は図1のようなブラックボックス関数を含むシステムを最適化することを目的とした機械学習の方法である。

いま、我々の目的はブラックボックス関数  $f$  を最大にする入力  $\mathbf{x}^*$  を見つけることとしよう：

$$\mathbf{x}^* = \operatorname{argmax}_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}} f(\mathbf{x}) \quad (1)$$

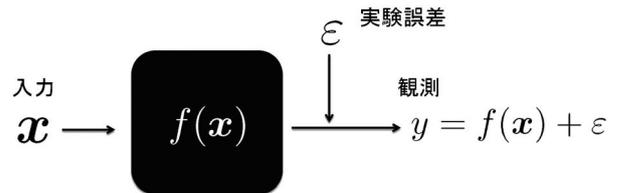


図1 ブラックボックス関数を含む入出力関係。

ここで、 $\mathcal{X}$  は、例えば可能な実験条件の集合を表す。 $\mathcal{X}$  が有限集合のとき、すなわち、 $\mathcal{X} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n\}$  のように可能な実験条件がリストアップされているような場合、この最適化問題をプール型と呼ぶ。一方で、実験条件の指定も最適化と同時に行うとき、すなわち、 $\mathcal{X} = \mathbb{R}^d$  のように各パラメータが値を取りうる空間のみが与えられている場合をクエリー型と呼ぶ。以下では、最もシンプルな問題設定であるプール型の最適化について解説する。

ベイズ最適化の基本的な思想は、可能な限り少ない実験回数でブラックボックス関数  $f$  の性質を理解し、これを最適化する、という点に集約される。そのため、ベイズ最適化は以下のプロセスの繰り返しとして実現される。

1.  $f$  に関する事前知識あるいは信念を統計モデル  $P$  として表現する。
2.  $P$  に基づいて次に実験すべき条件  $\mathbf{x}_{\text{next}}$  を  $\mathcal{X}$  から選択する。
3. 実験条件  $\mathbf{x}_{\text{next}}$  において実験を行い、 $y_{\text{next}}$  を観測する。 $(\mathbf{x}_{\text{next}}, y_{\text{next}})$  に基づいて  $P$  を更新する。

### (1) ガウス過程による $f$ のモデル化

まず1について、目的関数  $f$  に対して統計モデルを導入する動機は、 $f$  がブラックボックスであってもその予測分布を

\* 理化学研究所革新知能統合研究センター；特別研究員

\*\* 名古屋工業大学；大学院生

\*\*\* 京都大学工学研究科；准教授，理化学研究所革新知能統合研究センター；客員研究員

\*\*\*\* 名古屋工業大学工学研究科；教授，理化学研究所革新知能統合研究センター；チームリーダー，物質材料研究機構；招聘研究員（〒466-8555 名古屋市昭和区御器所町）

Introduction to Bayesian Optimization and Its Application to Material Engineering; Kota Matsui\*, Kenta Kanamori\*\*, Kazuaki Toyoura\*\*\* and Ichiro Takeuchi\*\*\*\* (\*RIKEN Center of Advanced Intelligence Project, Tokyo. \*\*Nagoya Institute of Technology, Nagoya. \*\*\*Kyoto University, Kyoto. \*\*\*\*Nagoya Institute of Technology, Nagoya. RIKEN Center of Advanced Intelligence Project, Tokyo. NIMS, Tsukuba)

Keywords: bayesian optimization, experimental design, blackbox function, gaussian process, acquisition function

2018年9月10日受理[doi:10.2320/materia.58.12]

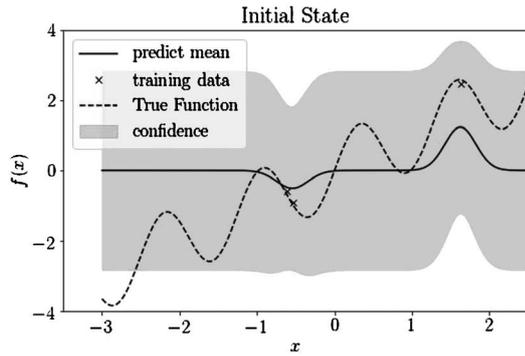


図2 ガウス過程によるブラックボックス関数 $f$ のモデリング. 破線が真の関数, 実線がガウス過程による予測関数の平均, 灰帯は予測関数の不確か性を表す.

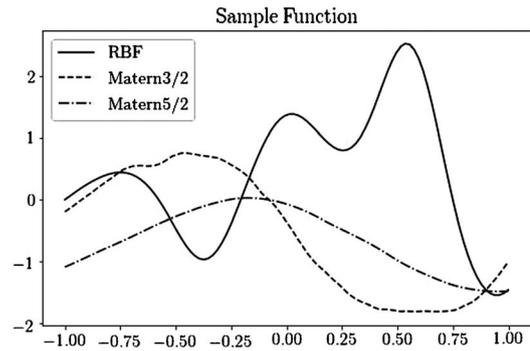


図3 各カーネルを用いたガウス過程からのサンプル. Matern3/2, Matern5/2, RBFの順により滑らかな関数がサンプリングされている.

求めることができる点にある. 予測分布を考察することで,  $f$ の予測値のみならず, その不確か性もモデル化することができる. ベイズ最適化の枠組みでは,  $f$ の統計モデルとしてガウス過程(Gaussian process)<sup>(2)</sup>が用いられることが多い. ガウス過程とは, 一言で言えば関数に対する正規分布であり, 平均関数 $\mu(\mathbf{x})$ と共分散関数(カーネル関数) $k(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ によって特徴付けられる. 図2にガウス過程による関数モデリングの例を示す.

#### (a) 平均関数と共分散関数の選択

ガウス過程モデルの事前分布の平均関数は, 実応用では定数関数 $\mu(\mathbf{x}) \equiv \mu_0$  (特に $\mu_0 = 0$ )とすることが多い. ベイズ最適化の進行とともに観測データに基づいて推定していく方針がよくとられる.

一方で, 共分散関数は, 目的関数の事前知識(滑らかさや振幅など)をモデルに反映させる, データ点に対して類似度を定義する(よく似た実験設定ならば出力も近い値をとることを期待する)といった重要な役割を持つ. 本稿では, ベイズ最適化の文脈で良く用いられるRadial Basis Function (RBF)カーネルとMatern3/2カーネル, Matern5/2カーネルの3種類を紹介する. 以下では $r = \|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|$ とする.

- RBFカーネル

$$k(\mathbf{x} - \mathbf{x}') := \exp\left(-\frac{r^2}{2\ell^2}\right) \quad (2)$$

- Matern3/2カーネル

$$k(\mathbf{x} - \mathbf{x}') := \left(1 + \frac{\sqrt{3}r}{\ell}\right) \exp\left(-\frac{\sqrt{3}r}{\ell}\right) \quad (3)$$

- Matern5/2カーネル

$$k(\mathbf{x} - \mathbf{x}') := \left(1 + \frac{\sqrt{5}r}{\ell} + \frac{5r^2}{3\ell^2}\right) \exp\left(-\frac{\sqrt{5}r}{\ell}\right) \quad (4)$$

ここで,  $\ell$ はバンド幅を制御するパラメータである. それぞれのカーネルを用いたガウス過程からサンプリングされた関数の例を図3に示す. カーネルの選び方によって, どの程度の滑らかさを関数に仮定するかをコントロールできることが分かる. 一般に, ブラックボックス関数は滑らかでないことが想定されるため, より滑らかでない関数を表現できる

Maternカーネルが用いられることが多い.

#### (2) 探索方針の考察

次に2について, 「次にどの設定で実験をするべきか(図2の横軸上のどの点で関数値を評価すべきか)」を決定する際の基本的なアイデアは, ある点 $x$ において実験を行い, 観測値 $y$ を得ることによってどの程度最適解 $\mathbf{x}^*$ に関する情報が得られるかを考察することである. 上述のように目的関数 $f$ に対して統計モデルを導入することで, この問題に対して様々な指標に基づいてアプローチすることが可能となる. 本節では, 代表的な3つのアプローチを紹介する. 以下では,  $m$ 点 $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_m \in \mathcal{X}$ が既に観測されているとし, 現在の最良の目的関数値を $\tau = \max_{i=1, \dots, m} f(\mathbf{x}_i)$ とおく.

##### (a) 改善確率に基づく探索

このアプローチでは, 候補点 $\mathbf{x}$ が現在の最良関数値 $\tau$ を改善する確率(probability of improvement)を評価する.

$$PI(\mathbf{x}) := \Pr(f(\mathbf{x}) > \tau) \quad (5)$$

PIが最大となる $\mathbf{x} \in \mathcal{X}$ を次の評価点とすることで, 目的関数値を改善する確率が高い点を次々と評価していく探索方針が得られる.

##### (b) 期待改善度に基づく探索

このアプローチでは, 候補点 $\mathbf{x}$ が現在の最良関数値 $\tau$ を改善する期待値(expected improvement)を評価する.

$$EI(\mathbf{x}) := \mathbb{E}[\max\{f(\mathbf{x}) - \tau, 0\}] \quad (6)$$

ここで,  $\mathbb{E}[X]$ は $X$ の期待値を,  $\max\{a, b\}$ は $a$ と $b$ のうち値の大きい方を返す関数である. EIが最大となる $\mathbf{x} \in \mathcal{X}$ を次の評価点とすることで, 目的関数の期待改善度が高い点を次々と評価していく探索方針が得られる.

##### (c) 上側不確か性に基づく楽観的探索

このアプローチは, 図2における青実線の上側の青帯の高さ(upper confidence bound)を評価する.

$$UCB(\mathbf{x}) := \mu(\mathbf{x}) + \beta\sigma(\mathbf{x}) \quad (7)$$

ここで,  $\sigma(\mathbf{x})$ は共分散関数 $k$ に基づいて定まる $\mathbf{x}$ の分散,  $\beta$ は探索と活用のトレードオフ(分散 $\sigma(\mathbf{x})$ を重視するか, 平均 $\mu(\mathbf{x})$ を重視するか)をコントロールするという役割を持つ.

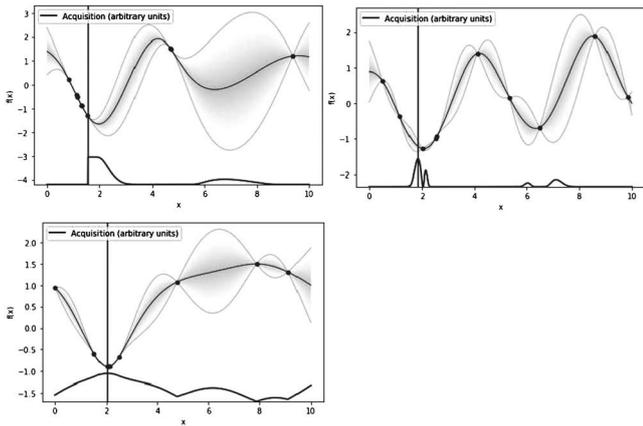


図4 (左上), (右上), (左下)がそれぞれPI, EI, UCBの獲得関数(下部の実線)を表す. いずれも非凸関数となっていることが分かる.

本節で紹介したPI, EI, UCBは獲得関数(acquisition function)と呼ばれ, ベイズ最適化において本質的な役割を果たす. 一方で, 「どの獲得関数を用いれば, より少ない探索回数で $f$ の最適解が得られるか」は当然ながら問題に依存する. 問題の構造を良く理解した上で, 適切な獲得関数を選択(場合によっては新たに設計)することが重要である.

また, 獲得関数は一般に非凸関数となるため, 大域最適解を求めることが難しい(図4参照). プール型の最適化問題の場合, 全ての候補点で獲得関数の値を評価することができれば可能であるが, 候補点の数が多い場合には非現実的になってしまう. 現実的な方法としては, マルチスタートの非線形最適化手法によって良い局所最適解を見つけるといったヒューリスティクスが用いられる.

### 3. 回帰におけるベイズ最適化

本節では回帰問題, すなわち, 図1における $y$ が実数値を取る場合( $y \in \mathbb{R}$ )におけるベイズ最適化を概説する.

回帰問題の場合, ガウス過程によるモデリングには, データ  $D_n = \{(\mathbf{x}_1, y_1), \dots, (\mathbf{x}_m, y_m)\}$  を観測した下で, 新たな点  $x$  における関数値  $f(x)$  が正規分布し, その事後平均と事後分散(すなわち統計モデルの更新式)が解析的に書ける, という利点がある.

$$f(\mathbf{x}) | D_n \sim N(\boldsymbol{\mu}_m(\mathbf{x}), \boldsymbol{\sigma}_m(\mathbf{x})),$$

$$\boldsymbol{\mu}_m(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\mu}(\mathbf{x}) + \mathbf{x}(\mathbf{x})^\top (K + \sigma^2 I)^{-1} (\mathbf{y} - \boldsymbol{\mu})$$

$$\boldsymbol{\sigma}_m^2(\mathbf{x}) = \mathbf{k}(\mathbf{x}, \mathbf{x}) - \mathbf{k}(\mathbf{x})^\top (K + \sigma^2 I)^{-1} \mathbf{k}(\mathbf{x})$$

ここで,  $\mathbf{k}(\mathbf{x}) = (\mathbf{k}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}), \dots, \mathbf{k}(\mathbf{x}_m, \mathbf{x}))^\top$ ,  $K_{i,j} = \mathbf{k}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$ ,  $\mathbf{y} = (y_1, \dots, y_m)$  であり,  $I$  は単位行列,  $\sigma^2$  は実験誤差  $\varepsilon$  の分散を表す.

$\boldsymbol{\mu}_m(\mathbf{x})$  と  $\boldsymbol{\sigma}_m(\mathbf{x})$  に基づいて2.(2)節で示したような獲得関数が定義され, その最大値を与える点が次の探索点として選択される. 図5に回帰におけるベイズ最適化の実行例を示す.

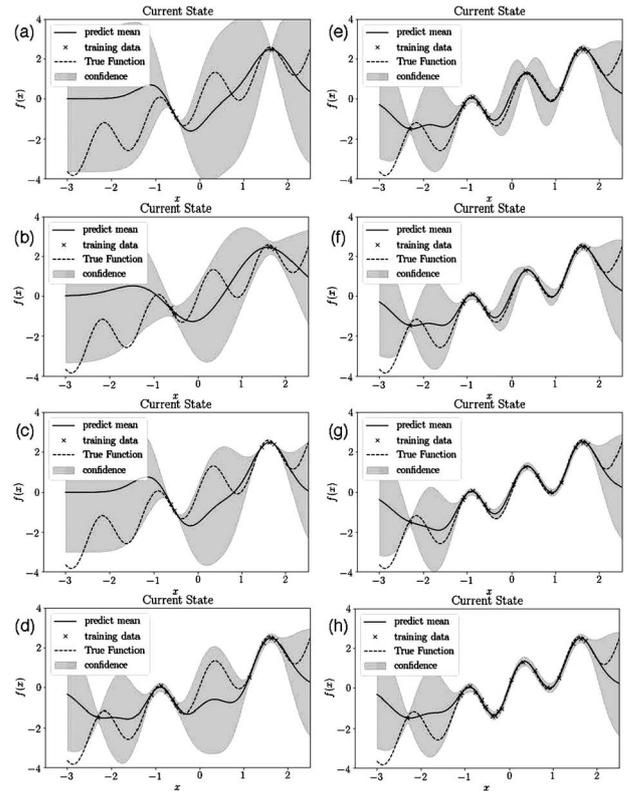


図5 回帰におけるベイズ最適化の実行過程((a)から(h)に向かって最適化が進行する). 獲得関数にはUCBを使用した. 山の高い部分にある程度調べて次の山に移るといった振る舞いを示す. 関数の極大となる点を重点的に探索する様子がみてとれる.

### 4. 判別におけるベイズ最適化

これまで, 入力  $\mathbf{x}$  に対して出力  $\mathbf{y}$  が連続値である場合を考察してきた. 一方, 現実の問題では出力が連続値を取らない状況も想定される. 例えば, 関数  $f$  の最大値ではなく,  $f$  がある閾値を超えるかどうかのみ興味がある場合を考えよう. 簡単のため, 閾値を0とし,  $f(\mathbf{x}) > 0$  のとき成功 ( $y=1$ ),  $f(\mathbf{x}) \leq 0$  のとき失敗 ( $y=0$ ) と定義する. すると問題は, 「ノイズの含まれる2値の出力から成功する確率が最も高い  $\mathbf{x}$  をできるだけ少ない探索回数で列挙する」という2値判別問題とみなすことができる.

出力が2値のとき, 回帰の場合のように  $f(\mathbf{x})$  の事後平均や事後分散を解析的に求めることができない. 従って, 何らかの方法で  $f(\mathbf{x})$  の事後分布を近似して計算する必要がある. 詳細は割愛するが, これまで観測した点における関数値  $\mathbf{f} = (f(\mathbf{x}_1), \dots, f(\mathbf{x}_m))$  の事後分布  $p(\mathbf{f} | D_m)$  をラプラス近似によって正規分布で近似することで, 事後平均や事後分散を回帰の場合とほぼ同じ形で書き下すことができる<sup>(2)</sup>. このようにして求めた近似的な事後分布に基づいて獲得関数の設計, 統計モデルの更新を行う.

図6に判別におけるベイズ最適化の実行例を示す. 図6

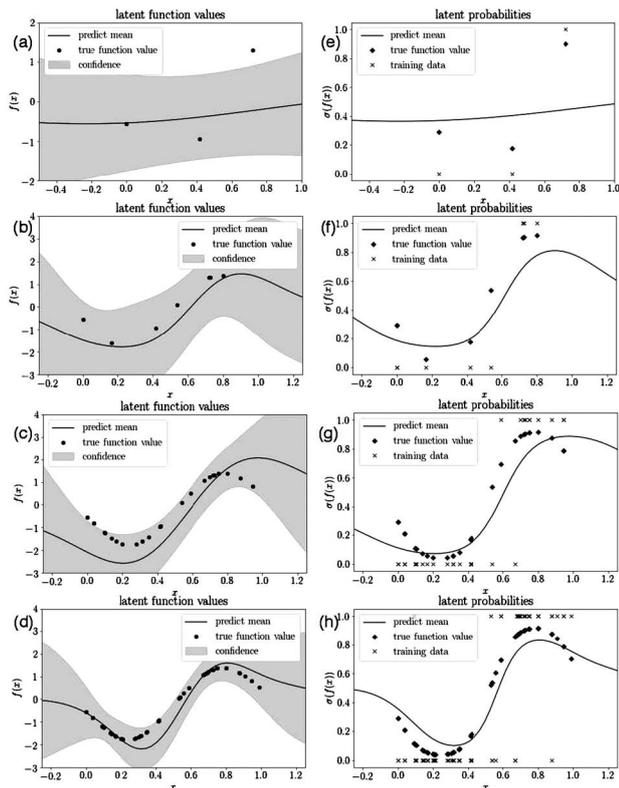


図6 判別におけるベイズ最適化の実行過程(上から下に向けて最適化が進行する). 獲得関数には UCB を使用した. 左図が目的関数  $f$  のモデリングを, 右図が予測確率のモデリングをそれぞれ表す.

の左列は目的関数  $f$  のガウス過程によるモデリングとそのベイズ最適化による更新過程を表している. 図6の右列は,

$$y = \begin{cases} 1 & f(\mathbf{x}) > 0 \Leftrightarrow p(y|\mathbf{x}) > \frac{1}{2} \\ 0 & f(\mathbf{x}) \leq 0 \Leftrightarrow p(y|\mathbf{x}) \leq \frac{1}{2} \end{cases}$$

なる対応によって左列のベイズ最適化プロセスを予測確率の世界に写したものである.

## 5. 材料工学への応用

最後に, ガウス過程モデルとベイズ最適化を材料科学の課題に利用した筆者らの最近の研究を簡単に紹介する<sup>(3)(4)</sup>. 電池材料などのイオン伝導性物質の伝導度を知るには, ポテンシャルエネルギー曲面内のイオン伝導経路を同定する必要がある. イオン伝導経路を同定できれば, その経路内の最安定点(エネルギー最小の点)とボトルネック点(経路内でエネルギー最大の点)を知ることができ, イオン伝導度を求めることができる. 第一原理計算などの物理シミュレーションを利用すると, コンフィギュレーション空間の各点におけるポテンシャルエネルギーを高精度に求めることができるが, ポテンシャルエネルギー関数全体を網羅的な第一原理計算で求めようとすると膨大な計算コストがかかってしまう. このた

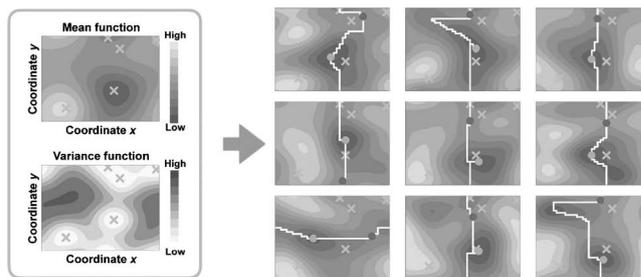


図7 2次元のガウス過程モデルとランダムサンプリングされた PE 曲面における電導経路推定の概念図.

め, ガウス過程モデルとベイズ最適化の考え方を拡張し, イオン伝導経路を特徴づける部分に対して選択的に第一原理計算を行うアプローチを検討した.

2.(2)節で議論したように, ベイズ最適化では興味の対象となる物性値の予測分布を求め, 適切な獲得関数を設計する必要がある. しかしながら, ガウス過程モデルからイオン伝導経路の予測分布を直接求めることはできないため, 筆者らは 1) ガウス過程モデルからのモンテカルロサンプリング, 2) 動的計画法によるイオン伝導経路推定, 3) 最安定点とボトルネック点に関する獲得関数を用いたベイズ最適化の3ステップのアプローチを提案した. ステップ1では, ガウス過程モデルが関数に対する確率分布であることを利用し, モンテカルロサンプリングによってポテンシャルエネルギー関数のランダムサンプルを数多く生成した. ステップ2では, ステップ1で生成したそれぞれのポテンシャルエネルギー関数に対して動的計画法を適用することで最適なイオン伝導経路を同定し, 最安定点とボトルネック点のランダムサンプルを得た. ステップ3では, ステップ2で得た最安定点とボトルネック点のランダムサンプルに基づいた獲得関数を設計し, 次に第一原理計算を適用すべきコンフィギュレーション点の選択を行った. これらの3ステップを繰り返すことで, イオン伝導経路に関する不確実性をモデリングし, モデルに基づくイオン伝導経路の推定を効率的に行うことができた.

紙面の都合上, 詳細な説明は省略するが, 図7に提案法のイメージを示す. 2次元空間のポテンシャルエネルギー(PE)曲面をガウス過程によってモデル化すると予測分布の平均関数と分散関数は図7左のように表される. また, このガウス過程モデルからランダムサンプリングによって PE 曲面の候補を多数作成し, 各候補に動的計画法を適用してイオン伝導経路を求めることで, イオン伝導経路の予測分布を推定することができる. このアプローチをプロトン伝導体の伝導度推定に利用することで, 網羅的計算に比べて大幅に計算コストを削減することができた.

## 6. おわりに

材料科学の問題にデータ科学のアプローチを利用する試みは材料情報学(Materials Informatics)と呼ばれ注目を集めて

いる。本稿で紹介したベイズ最適化のアプローチを利用することで、材料科学における実験やシミュレーションのコストを大幅に削減することが期待できる。第5節の例のように、ベイズ最適化においては興味の対象となる物性値の予測分布を計算し、その不確かさを効率的にへらすための獲得関数を設計する必要がある。さまざまな実用問題に応じたベイズ最適化の拡張として、制約付きベイズ最適化<sup>(5)</sup>、多目的ベイズ最適化<sup>(6)</sup>などのアプローチが提案されており、材料科学へのベイズ最適化の利用はますます増えていくものと期待される。

本研究の一部は、科学研究費(17H00758, 16H06538), JST CREST (JPMJCR1302, JPMJCR1502), 理化学研究所革新知能統合研究センター, および, JST イノベーションハブ構築支援事業・情報統合型物質・材料開発イニシアティブの補助を受けて行われた。

## 文 献

- (1) B. Shahriari, K. Swersky, Z. Wang, R. Adams and N. D. Freitas: Proceedings of the IEEE, **104**(2016), 148–175.
- (2) C. E. Rasmussen and C. K. I. Williams. Gaussian: Processes for Machine Learning. MIT Press, (2006).
- (3) K. Kanamori, K. Toyoura, J. Honda, K. Hattori, A. Seko, M. Karasuyama, K. Shitara, M. Shiga, A. Kuwabara and I. Takeuchi: Phys. Rev. B, **97**(2018), 125124.
- (4) K. Toyoura, D. Hirano, A. Seko, M. Shiga, A. Kuwabara, M. Karasuyama, K. Shitara and I. Takeuchi: Phys. Rev. B, **93**(2016), 054112.
- (5) J. M. Hernández-Lobato, M. Gelbart, R. Adams, M. Hoffman

and Z. Ghahramani: The Journal of Machine Learning Research, **17**(2016), 5549–5601.

- (6) D. Hernández-Lobato, J. Hernandez-Lobato, A. Shah and R. Adams: International Conference on Machine Learning, (2016), 1492–1501.

★★  
松井孝太

2017年名古屋大学にて博士(情報科学)を取得。名古屋工業大学特任研究員、名古屋大学特任助教を経て、2018年6月より現職。医学・材料科学における統計・機械学習の方法論の開発と応用研究に従事。

金森研太

2018年名古屋工業大学大学院工学研究科情報工学専攻修士課程を修了。機械学習に基づく実験計画の研究に従事。

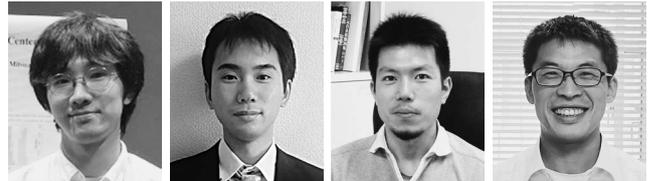
豊浦和明

2008年京都大学にて博士(工学)を取得。学術振興会特別研究員、キャノンヨーロッパ財団リサーチフェロー、京都大学特定研究員、名古屋大学助教を経て、2016年4月より現職。2018年12月より理化学研究所・革新知能統合研究センター・オンライン意志決定ユニット・客員研究員を兼務。第一原理計算と機械学習による新規固体イオニクス材料の高効率探索に従事。

竹内一郎

2000年名古屋大学にて博士(工学)を取得。学術振興会特別研究員、三重大学助教、名古屋工業大学准教授を経て、2015年4月より現職。2016年9月より理化学研究所革新知能統合研究センター・データ駆動型生物医学科学チーム・チームリーダーを兼務。データ駆動型人工知能の基盤となる機械学習の研究と実践に従事。

★★



松井孝太

金森研太

豊浦和明

竹内一郎

# パーシステントホモロジーの基礎と 材料工学への適用例

平岡 裕章\* 大林 一平\*\*

## 1. データの形

膨大な実験画像データ, Protein Data Bank, 大規模シミュレーションで再現される原子配置データ等々, 現在の諸科学・産業の現場ではデータが溢れている. このようなデータ群から考察対象に対して新たな発見や理解を深めることを可能にするデータ科学が昨今人気である. このようなデータ駆動型の問題では「データが多い」ことよりもむしろ「データが複雑」であることが問題である場合が多い. その場合一見複雑な構造に見えるデータを何らかの形で変換し低次元化できれば, よりデータ構造の本質に迫ることが可能になるであろう. 複雑なデータに対して適切な記述子を開発することは現在のデータ科学における重要な課題となっている.

例えば  $N$  次元ユークリッド空間の有限個の点の集まり

$$P = \{x_i \in \mathbb{R}^N \mid i = 1, \dots, m\} \quad (1)$$

からなるデータを考える. 簡単な状況として  $P$  が周期的に配置された点の集まりの場合は, フーリエ解析が代表的な記述子を与える. また  $P$  が幾つかのクラスターの集まりで構成されているときは, 各クラスターを記述子としデータを表現することも可能であろう. 周期系  $P$  では点たちの周期的なつながり, クラスター系では点たちの近さに関するつながりといったように, 点たちのつながり具合を特徴付けることでデータの構造は表現できる. しかしながら, 後述するガラスの原子配置などからも明らかのように, 現在のデータ科学が直面している諸問題に対してこれらの古典的な解析手法は役不足であり, より詳細な構造を表現できる記述子の開発が望まれている.

例えば図1(a)で与えられる平面上のデータを考えて見る. この場合クラスターとしての特徴づけではなく, 「穴」の存在としてデータのつながり具合を特徴づける方が自然に見える. このような図形のつながり具合を大雑把に調べることが, 現代数学の一分野であるトポロジーが得意とするところである. 特に, 穴の存在に着目した特徴抽出は, 従来ホモロ

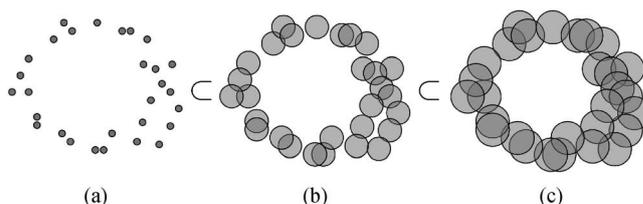


図1 「穴」の構造を持つデータ(a)とそれを球体で膨らませたモデル(b), (c).

ジーと呼ばれる概念がその役割を担ってきた. 実際, 図1のようなデータに対しては, 各点を適当に膨らませた球で置き換えることで, 1次ホモロジーを用いてデータに内在する穴を検出することができる<sup>†</sup>. さらにホモロジーの概念を拡張したパーシステントホモロジーを用いることで, 穴の存在だけでなくその形や大きさなどのより詳細な幾何情報も得ることができ, 「データの形」を調べることが可能になる.

本稿では大学1年生程度の基本的な線形代数の知識のみを仮定して, パーシステントホモロジーについての解説を試みる. その後, 著者らが近年取り組んでいるシリカガラスへの応用や機械学習との融合についても紹介する. なお, ここで取り扱う内容のより詳細については参考文献<sup>(1)-(3)</sup>を参照されたい. また, 我々のグループではここで紹介するパーシステントホモロジーの計算ソフトウェア「HomCloud」も開発している<sup>(4)</sup>. このソフトウェアはトポロジーの予備知識を仮定しない素人でも, パーシステントホモロジーを用いて材料の構造解析までを楽しめる. 本解説記事とあわせて HomCloud を実際に計算させることで, より理解が深まると思われる. なお, 本記事の前半は参考文献<sup>(3)</sup>をもとに構成している.

## 2. 幾何モデル

点列データ(1)に対して適当なデータ処理を施しその形を

\* 京都大学高等研究院; 教授, 理化学研究所革新知能統合研究センター; チームリーダー(〒606-8501 京都市左京区吉田牛ノ宮町)

\*\* 理化学研究所革新知能統合研究センター; 研究員

Persistent Homology and Its Applications to Materials Science; Yasuaki Hiraoka\* and Ippei Obayashi\*\* (\*KUIAS, Kyoto University and AIP, RIKEN., Kyoto. \*\*AIP, RIKEN., Sendai)

Keywords: topology, homology, persistent homology, persistence diagram, machine learning, silica glass

† クラスター解析は0次ホモロジーに対応する.

2018年8月21日受理[doi:10.2320/materia.58.17]

調べていこう。その際、(i)穴の抽出が可能、(ii)計算機での処理が可能、の2点を満たす数学的概念にČech複体とよばれる単体複体(多面体)がある。

ここで有限集合  $V$  上の単体複体  $X$  とは、 $V$  の部分集合の集まりで、(i)全ての点  $a \in V$  について  $\{a\} \in X$ 、(ii)  $\sigma \in X, \tau \subset \sigma \Rightarrow \tau \in X$ 、を満たすもので与えられる。 $X$  の要素  $\sigma$  で点の個数が  $|\sigma| = k + 1$  個となるものを  $k$  単体といい、 $k$  を単体  $\sigma$  の次元という ( $|\sigma|$  は  $\sigma$  の点の個数)。単体複体  $X$  の次元  $\dim X$  を、 $X$  に含まれる単体の次元の最大値で定め、また記号  $X_k$  で  $X$  の  $k$  単体の集まりを表すことにする。

このときČech複体  $\mathcal{C}(P, r)$  とは  $P$  上の単体複体であり、その単体は

$$\{x_{i_0}, \dots, x_{i_k}\} \in \mathcal{C}(P, r) \iff \bigcap_{a=0}^k B_r(x_{i_a}) \neq \emptyset$$

で割り当てられる。ここで  $B_r(x_i) = \{x \in \mathbb{R}^N \mid \|x - x_i\| \leq r\}$  は点  $x_i$  を中心とする半径  $r$  の球を、記号  $\emptyset$  は空集合を表す。つまり半径  $r$  の球の交わりを調べることで単体を構成していくのである。

図2は、パラメータ  $r$  を変化させた際の、Čech複体の変化を表示している。ここで、各半径  $r$  ごとに上段の球の和集合と下段のČech複体は、互いに連続変形で移り合えることに気がつく。これは脈定理と呼ばれるトポロジーの基本定理からの帰結であり、 $\bigcup_{i=1}^n B_r(x_i)$  と  $\mathcal{C}(P, r)$  は切り張りしない連続変形で移り合える<sup>†</sup>ことが保証されている。よって特に穴の情報は保存される。

このようにČech複体はデータ  $P$  とパラメータ  $r$  により定まる。パラメータ  $r$  が十分小さいとき、Čech複体は  $P$  と同じ離散的なデータ構造を与える。一方、 $r$  が徐々に大きくなると、データ間のつながりが生まれ始め、十分大きくすると全てが完全につながった状態になる。このように、 $r$  はデータのつながり具合を操る解像度とみなすことができる。

また、パラメータの増大列  $r_1 < \dots < r_n$  に応じて、Čech複体の増大列  $\mathcal{C}(P, r_1) \subset \dots \subset \mathcal{C}(P, r_n)$  が得られることにも注意する。このような単体複体の増大列のことをフィルトレーションと呼ぶ。

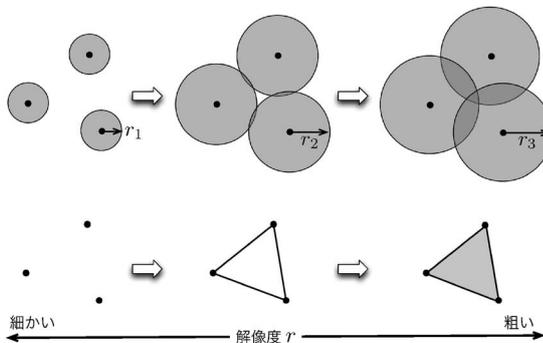


図2 上段は球の増大列。下段は対応するČech複体の増大列。

<sup>†</sup> ホモトピー同値。

実際の数値計算では、ここで紹介したČech複体と同じ性質を持ちかつ計算効率の良いアルファ複体<sup>(1)</sup>がよく用いられる。その説明には幾つか準備が必要なためここでは割愛するが、ソフトウェアとしてはCGAL<sup>(5)</sup>が公開されている。また本稿では式(1)の形の入力データのみ扱うが、その他の重要な幾何モデルとして方体複体が挙げられる。方体複体に対しても次節以降の話題は適用でき、それらは画像解析などへの応用が強く期待されている。方体複体の詳細については文献<sup>(6)</sup>を挙げておく。

### 3. ホモロジー

ホモロジーとは、単体複体の中に存在する穴を代数的に抽出する道具である。ここでは、説明の簡略化と次節以降の話題を考慮して、ベクトル空間としてホモロジーを導入する。

単体複体  $X$  の頂点集合を  $V = \{1, \dots, n\}$  としよう。ここで単体  $\sigma$  の頂点を順序付きで並べたものを  $\langle \sigma \rangle = \langle v_0 \dots v_k \rangle$  と書くことにする。つまり  $v_0 < \dots < v_k$  であり不等号は  $V = \{1, \dots, n\}$  上に定まる通常のものを用いる。

まず単体の次元  $k$  ごとに、 $k$  単体を基底として持つ体  $K$  上のベクトル空間<sup>\*</sup>

$$C_k(X) = \left\{ \sum_{\sigma \in X_k} a_\sigma \langle \sigma \rangle \mid a_\sigma \in K \right\}, \quad 0 \leq k \leq \dim X$$

を導入する。ここで  $k < 0, k > \dim X$  では  $C_k(X) = 0$  としておく。ホモロジーの考え方では、穴を抽出する為にまずは境界を特徴づける。そこで、境界作用素と呼ばれる線形写像  $\partial_k: C_k(X) \rightarrow C_{k-1}(X)$  を

$$\partial_k \langle v_0 \dots v_k \rangle = \sum_{i=0}^k (-1)^i \langle v_0 \dots \hat{v}_i \dots v_k \rangle,$$

$$\partial_k (\sum a_\sigma \langle \sigma \rangle) = \sum a_\sigma \partial_k \langle \sigma \rangle$$

で導入する。ここで  $\langle v_0 \dots \hat{v}_i \dots v_k \rangle$  は  $v_i$  を除くことを意味する。また2番目の式は1番目の式の線形拡張である。

定義に従って計算をすると、 $\partial_k \circ \partial_{k+1} = 0$  を確認でき、これより  $\text{im } \partial_{k+1} \subset \ker \partial_k$  が従う<sup>††</sup>。このとき、単体複体  $X$  の  $k$  次ホモロジーは、商ベクトル空間

$$H_k(X) = \ker \partial_k / \text{im } \partial_{k+1} = \{[c] \mid c \in \ker \partial_k\}$$

で定められる。ここで  $[c] = c + \text{im } \partial_{k+1}$  は同値類を表す記号である。また  $H_k(X)$  のベクトル空間としての次元を  $\beta_k(X)$  と書き  $k$  次ベッチ数と呼ぶ。次の例で確かめるが、 $H_k(X)$  は  $X$  に存在する  $k$  次元の穴をベクトル空間として表現し、またベッチ数  $\beta_k(X)$  は  $k$  次元の穴の数を表すことになる。

**Example 3.1.** 頂点集合  $V = \{1, 2, 3\}$  上の単体複体

$$\begin{array}{c} 2 \\ \diagup \quad \diagdown \\ 1 \quad \quad 3 \end{array} \quad X = \{\{1, 2\}, \{1, 3\}, \{2, 3\}, \{1\}, \{2\}, \{3\}\}$$

のホモロジーを計算してみる。境界作用素は  $\partial_k = 0 (k \neq 1)$  と

<sup>\*</sup>  $K$  は実数体  $\mathbb{R}$  や有理数体  $\mathbb{Q}$  とする。

<sup>††</sup>  $\text{im}, \ker$  は線形写像の像と核を表す。

$$\partial_1 = \begin{bmatrix} \langle 12 \rangle & \langle 13 \rangle & \langle 23 \rangle \\ -1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{matrix} \langle 1 \rangle \\ \langle 2 \rangle \\ \langle 3 \rangle \end{matrix}$$

で与えられる。よって、1次ホモロジーは

$$H_1(X) = \ker \partial_1 = \text{span}\{\langle 12 \rangle - \langle 13 \rangle + \langle 23 \rangle\} \simeq K$$

となり、1次元の穴(リング) $\langle 12 \rangle - \langle 13 \rangle + \langle 23 \rangle$ から生成される。同様に計算をしてみると、0次ホモロジーも1次元ベクトル空間 $H_0(X) \simeq K$ となり、0次元の穴(連結成分)が1つ存在する事を示している。

包含関係にある単体複体の組 $X \subset Y$ には、それぞれホモロジーが定まるが、さらに線形写像

$$H_k(X) \ni [c] \mapsto [c] \in H_k(Y)$$

が誘導される。ここで定義域の $[c]$ は $H_k(X)$ での同値類を、値域の $[c]$ は $H_k(Y)$ での同値類をそれぞれ示している。

**Example 3.2.**  $X$ を例3.1と同じ単体複体とし、 $Y = X \cup \{1, 2, 3\}$ とする。単体複体 $Y$ では、 $\text{im } \partial_2 = \ker \partial_1 = \text{span}\{\langle 12 \rangle - \langle 13 \rangle + \langle 23 \rangle\}$ より、 $H_1(Y) = 0$ である。よって、誘導される線形写像 $H_1(X) \rightarrow H_1(Y)$ は零写像となる。これは、包含写像 $X \rightarrow Y$ で穴が消滅していることを示している。一方、 $Y' = X \cup \{4\} \cup \{1, 4\}$ としておくと、誘導される線形写像 $H_1(X) \rightarrow H_1(Y')$ は同型写像となる。これは包含写像 $X \rightarrow Y'$ での穴の存続を意味する。

Čech 複体 $\mathcal{C}(P, r)$ のホモロジーを計算することで、データ $P$ に内在する穴の情報が取り出せることになる。例えば図1のデータについては、(a), (b), (c)の3つの半径パラメータ $r_1 < r_2 < r_3$ ごとに、1次ホモロジーは

$$H_1(\mathcal{C}(P, r_1)) = 0, \quad H_1(\mathcal{C}(P, r_i)) \simeq K (i=2, 3)$$

で与えられる。ここで $r_2$ では右下の方に存在する小さな穴、 $r_3$ ではデータ全体で構成されている大きな穴が、1次元のベクトル空間として表現されている。しかしながら、これらの1次元ベクトル空間を個別に調べるだけでは、それぞれの穴の大きさや、 $r_2$ での穴が消滅し $r_3$ で新たな穴が発生しているといった存続性を調べることはできない。

このような穴の性質を調べるには、例3.2のように、包含関係が誘導する線形写像 $H_1(\mathcal{C}(P, r_2)) \rightarrow H_1(\mathcal{C}(P, r_3))$ を調べればよい。この場合の線形写像は零写像で与えられ、穴の消滅と発生がきちんと記録されていることに注意されたい。

このように、ホモロジーと包含写像が誘導する線形写像をうまく組み合わせることで、データに存在する穴とその幾何学的な情報を抽出することが可能になる。次に説明するパーシステントホモロジーは、この考え方をさらに発展させた道具である。

#### 4. パーシステントホモロジー

前節のホモロジーは単体複体に対して定められたが、パーシステントホモロジーは単体複体のフィルトレーション $\mathcal{X}: X^1 \subset \dots \subset X^i \subset \dots$ に対して定義される。ここでフィルトレーション $\mathcal{X}$ は、あるパラメータ $n$ 以降では $X^i = X^n (i \geq n)$ であ

ると仮定する。また、単体 $\sigma \in X^n$ の発生時刻を $t_\sigma = \min\{t | \sigma \in X^t\}$ で定める。このときパーシステントホモロジー $H_k(\mathcal{X})$ は、各 $X_i$ でのホモロジー $H_k(X_i)$ とその間に誘導される線形写像の列

$$H_k(\mathcal{X}) : H_k(X_1) \rightarrow \dots \rightarrow H_k(X_i) \rightarrow \dots \rightarrow H_k(X_n) \quad (2)$$

として定められる。線形写像が包含関係から誘導されていることから、直感的には $k$ 次元の穴がフィルトレーション内でどの程度存続しているかが記録されているであろう。実際、パーシステントホモロジー $H_k(\mathcal{X})$ に対して $b_i, d_i \in \{1, \dots, n\}$  ( $b_i \leq d_i$ )および非負整数 $\ell_k$ が一意に定まり

$$H_k(\mathcal{X}) \simeq \bigoplus_{i=1}^{\ell_k} I[b_i, d_i] \quad (3)$$

の形に分解できることが知られている。ここで区間 $I[b, d]$ は0および1次元ベクトル空間 $K$ の $n$ 個の列とそれらの間の線形写像として

$$I[b, d] : 0 \rightarrow \dots \rightarrow K \rightarrow \dots \rightarrow K \rightarrow \dots \rightarrow 0$$

で与えられ、左端の $K$ は $b$ 番目、右端の $K$ は $d$ 番目に位置している。ここで中央に連続して現れる $K \rightarrow K$ は恒等写像で与えられる。そのトポロジカルな意味は、 $X_b$ で発生し $X_d$ まで存続しその後消滅する $k$ 次元の穴を表している。

一意な分解式(3)より、発生と消滅の組 $(b_i, d_i)$ を指定することでパーシステントホモロジーは同型の差を除いて決まる。そこでこの組を平面上の多重集合

$$D_k(\mathcal{X}) = \{(b_i, d_i) | i=1, \dots, \ell_k\}$$

として表示したものを、 $\mathcal{X}$ の $k$ 次パーシステント図と呼ぶ。

定義より、パーシステント図の点は全て対角線より上側に位置する。対角線付近の点 $(b_i, d_i)$ は存続時間 $\ell_i = d_i - b_i$ が短く、一方で、対角線から離れた点は存続時間が長い穴に対応する。このように、パーシステント図を描かせることで、視覚的に穴の存続性を理解することができる。例えば、図1のデータからČech 複体のフィルトレーションを構成し、その1次パーシステント図を描かせると、中央の図に存在する右下の小さい穴は対角線付近に現れ、一方で右図にある大きな穴は対角線から離れたところに位置することになる(図3参照)。パーシステント図に現れる発生・消滅対 $(b, d)$ (もしくは式(3)に現れる $I[b, d]$ )をパーシステント図の生成元ともいう。

パーシステントホモロジーには幾つかの導入の仕方があるが、前節と同様に境界作用素を用いた定義や、行列の基本変

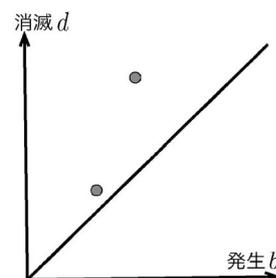


図3 図1の1次パーシステント図。

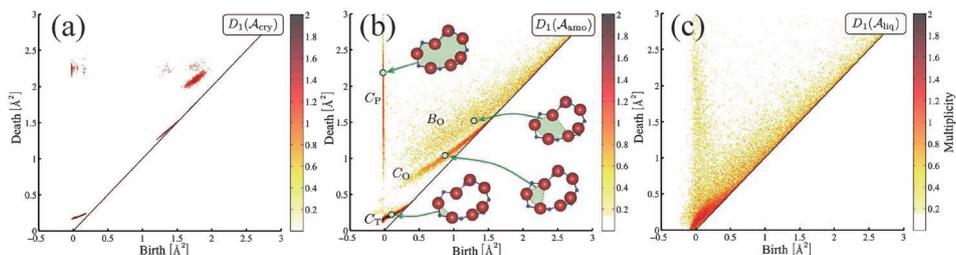


図4 シリカの1次パーシステント図((a):結晶, (b):ガラス, (c):液体). 色付けは対数重複度を用いている. (b)にはそれぞれの領域で特徴的な原子リング構造を示している(赤球:酸素原子, 青球:ケイ素原子). (オンラインカラー)

形を用いた表示式(3)の導出については, 例えば拙著<sup>(2)</sup>もしくは解説記事<sup>(7)</sup>を参照されたい.

## 5. シリカガラスの構造解析

この節では著者らが最近出版した論文<sup>(8)</sup>で議論した, パーシステントホモロジーを用いたガラスの構造解析に関する成果を部分的に紹介する.

よく知られているようにガラス状態の原子配置は一見無秩序に配置されているように見える. しかしながら動径分布関数や散乱パターンをみると, 液体状態とは近距離や中距離オーダーで違いが見られる. このようなガラスの幾何構造を明確に特徴付ける新たな記述子の開発は科学・産業の両側面から強く期待されている.

そこでガラスの原子配置を空間点データ(1)とみなしパーシステント図を描かせてみよう. 図4は分子動力学シミュレーションで計算したシリカの結晶, ガラス, 液体状態の原子配置に対して1次パーシステント図を計算したものである(シミュレーションを含む計算の詳細は原論文<sup>(8)</sup>を参照されたい). 1次のパーシステント図ということでリング構造に着目していることに注意しておく.

まず結晶状態(a)では実現できるリングの形が限られていることから, パーシステント図は幾つかの孤立島から構成されている(完全結晶の場合は0次元的な点の集まりに収束する). また液体状態ではリング形状をある程度自由に変形できることが反映されて, パーシステント図が2次元的に散布されている. 一方で, ガラスのパーシステント図にのみ曲線( $C_P$ ,  $C_T$ ,  $C_O$ )が現れていることに注意する. いささか乱暴に要約すると, パーシステント図のサポートの次元が0, 1, 2に応じて結晶, ガラス, 液体の3状態が識別されていることになる. つまりパーシステント図のサポート次元はガラス転移を幾何学的に説明する「秩序変数」として振る舞っているようにも見える†.

さてここまでは与えられた原子配置に対してパーシステント図を求めたが, 得られたパーシステント図の生成元を指定した際, その生成元を構成している原子の集まりを再現することが可能である. これはパーシステントホモロジーの生成

元についての逆問題とみなすことができ, これによりパーシステント図の中で興味ある特徴(例えば曲線など)が得られた際に, 具体的にその特徴を生み出す原子配置を特定することが可能になる. ここで生成元は商ベクトル空間の元を用いて記述されていることから, 一般には指定された生成元を与える点データは複数存在するが, 適切な最適化問題の設定を導入することで逆を一意に定めることが可能となる. 詳細は論文<sup>(9)</sup>を参照されたい.

次にガラスのパーシステント図に現れる曲線の意味を考えてみる. まずこれらの曲線は, シミュレーションのパラメータを保ったまま時間発展させた場合, その形状は不変に保たれる. つまり熱的なゆらぎのもとでパーシステント図の生成元は曲線の接線方向には動けるが, 曲線の法線方向には動くことができないことが観測される. ここでパーシステント図の生成元は原子配置のリング構造から定められていることを思い出そう. よってここで観察される法線方向に動けないという制約条件は, 熱ゆらぎのもとでの原子のリング構造の幾何学的な制約に他ならない. また同様に接線方向はリング形状の許容される変形を示していることになる. つまりガラスの硬さに関する制約条件がパーシステント図に埋め込まれているとも思える. 実際に, 論文<sup>(8)</sup>では加圧シミュレーションのもとでガラスのパーシステント図に現れている曲線が不変であることが示されている.

本稿では紙面の都合でシリカガラスの構造解析のみ取り扱ったが, その他の材料科学への適用例は論文<sup>(10)-(12)</sup>などを挙げておく.

## 6. パーシステント図の機械学習

上の節のようにパーシステント図を直接目で比較してデータの特徴的なパターンを発見できるというのは幸運な場合で, 実際にはそれではよくわからない場合が多い. そこでどうするかというと, 多くのパーシステント図を用意してそれを統計的に処理することで何らかの特徴的なパターンを発見するのである. この節では文献<sup>(13)</sup>で導入された手法について解説する.

ここで紹介する機械学習の手法の全体像は図5で示されたものである. 一般的な機械学習の手法では, 個々の入力データをデータの特徴を抽出したようなベクトルに変換し, その

† この考察を正当化することは興味深い課題であると思われる.

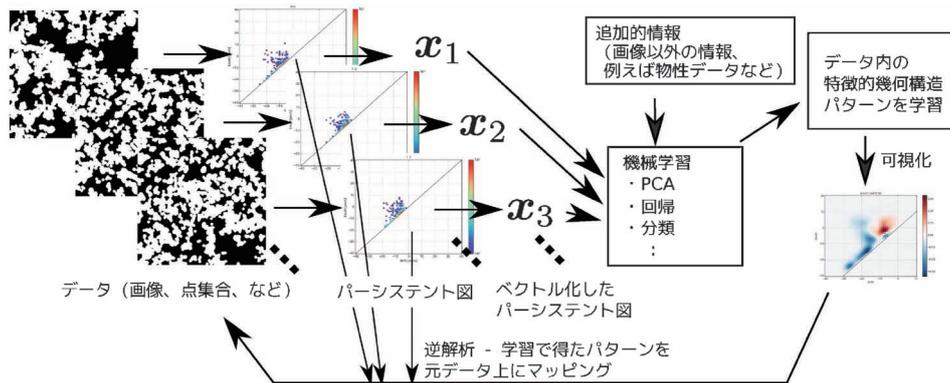


図5 パーシステントホモロジーを機械学習を組み合わせた手法の概要。(オンラインカラー)

ベクトルに対して解析をする(このベクトルは特徴量と呼ばれる)。パーシステント図をうまくベクトルに変換することで、入力データの特徴的な幾何パターンを取り出すことができる。パーシステント図の変換手法は様々な手法が提案されているが、ここでは Persistence Image (PI) と呼ばれるシンプルな手法を利用する。また、機械学習の手法としては単純な(一般化)線形モデルと呼ばれる手法を用いる。PI と線形モデルの組み合わせは、そのシンプルさゆえに図5のような逆解析を利用した手法と相性が良く、学習結果を理解するのに有効である。

まずはPIについて解説する。PIは論文<sup>(14)</sup>で導入された手法で、基本的なアイデアとしてはパーシステント図のヒストグラムの各ビンの頻度数をベクトルの各要素とみなす、というものである。ただ、このような安直な方法だと入力への微小なノイズに対してベクトルが大きく変化してしまうという欠陥がある。またパーシステント図の上の各点の重要度(対角線から離れるほど重要度が高い)が反映されないという欠点もある。これらの問題を解決するため、PIでは次のような平面上の分布関数  $\rho$  をヒストグラムのかわりに考える。

$$\rho(x, y) = \sum_{(b_i, d_i) \in D_k(\mathcal{X})} w(b_i, d_i) \exp\left(-\frac{(x-b_i)^2 + (y-d_i)^2}{2\sigma}\right) w(b, d) = \arctan(C(d-b)^p) \quad (4)$$

ここで  $\sigma, C, p$  はパラメータで、データに合わせて適当に事前に決める必要がある。これは  $D_k(\mathcal{X})$  の各点に  $w$  の重みの2次元ガウス分布を置いて足し合わせたものである。 $w$  は対角線との距離によって決まり、対角線に近くなるほど点の重要度が低くなることを反映している。またガウス分布を使うことで実用上はパーシステント図の2次元平面をグリッドに切ってこの関数を有限次元に近似して利用する。このようにすることでノイズの問題や重要度の問題に対応する。

次に機械学習について解説しよう。機械学習、特にここで紹介する教師あり機械学習の目的は  $(\mathbf{x}_1, y_1), \dots, (\mathbf{x}_n, y_n) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}$  という  $n$  個のデータからその背後に隠された  $\mathbf{x}$  と  $y$  の間の関係  $y=f(\mathbf{x})$  を発見することである。データにはノイズやランダムネスが含まれているので、 $y_i=f(\mathbf{x}_i)$  を満たすような  $f$  を見つければ良い、というわけではなく、ノイズなどの

影響を取り除いた  $f$  を見つけることが機械学習の鍵となる。線形モデルというのは  $f$  に

$$f(\mathbf{x}) = \mathbf{a} \cdot \mathbf{x} + b + (\text{noise}) \quad (5)$$

という形を仮定し、 $\mathbf{a}$  と  $b$  をデータからうまく調整する(これが「学習」である)ことで適切な  $f$  を見いだす。

この2つのアイデアを組み合わせるために、 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^N$  としてPIで得られたベクトルを利用する。パーシステント図が抽出した幾何的特徴をベクトルに符号化して機械学習と組み合わせることで、幾何構造と  $y$  の関連を見出すのである。(4)と(5)を組み合わせると、(5)に現れる  $\mathbf{a}$  をパーシステント図の平面上の符号付き分布と見なすことで、 $y$  とパーシステント図の関係は近似的に

$$y = \sum_{(b_i, d_i) \in D_k(\mathcal{X})} \int a(x, y) w(b_i, d_i) \exp\left(-\frac{(x-b_i)^2 + (y-d_i)^2}{2\sigma}\right) \times dx dy + b + (\text{noise}) \quad (6)$$

と表されることがわかる。ここで  $a(x, y)$  はベクトル  $\mathbf{a}$  をPIの離散化のルールを逆に考えて平面上の分布とみなしたものである。この式の

$$\int a(x, y) w(b_i, d_i) \exp\left(-\frac{(x-b_i)^2 + (y-d_i)^2}{2\sigma}\right) dx dy$$

の部分がパーシステント図の各点  $(b_i, d_i)$  がどの程度  $y$  の値に貢献しているかを表しており、 $a(x, y)$  の正負や大きさによってその貢献度が変化するのがわかる。これによって  $y$  の値に対する貢献度が大きい  $(b_i, d_i)$  を特定することができる。 $b_i, d_i$  の各値はその幾何構造の特徴的空間スケールに対応しているため、その値から  $y$  と関連の深い重要な空間スケールを特定することができる。さらにこの重要度が高い  $(b_i, d_i)$  を上で説明した逆問題の手法で入力データに戻すことで  $y$  の値に重要なかたちを具体的に特定することもできるのである。材料の問題にこの手法を適用する場合には  $y$  として注目している物性値を使うのである。文献<sup>(12)</sup>では焼結鈷のX線CT画像にこの解析手法を適用して、 $\mathbf{x}$  としてCT画像の酸化鉄やカルシウムフェライトの部分の形状から計算されたパーシステント図をベクトル化したもの、 $y$  として画像から取り出したクラックの大きさを使うことで、クラックと相関の強いかたちを特定することに成功した。このかたちは焼結鈷のき

裂発生サイトと深い関係があると考えられる。

実際の問題に適用する際には、式(6)のような線形の関係が成立していると期待できない場合もある。そういった場合にもロジスティック回帰のような一般化線形モデルを利用することで問題を解決できる可能性がある。また主成分分析のような教師なし機械学習の利用も考えられる。文献<sup>(12)</sup>では主成分分析を使って焼結鉄の還元反応による変化の特徴付けも行われている。こういった手法や、機械学習をする場合の注意点などについては文献<sup>(13)</sup>を参照してほしい。正則化項による過学習の抑制、 $l_1$ 正則化項を使うことによるスパースな学習、ロジスティック回帰、パーシステント図の情報に $+\alpha$ の情報をつけ加えることによる性能の向上、といった問題について議論している。また、文献<sup>(15)</sup>ではパーシステント図に対してカーネル法を開発している。

## 文 献

(1) H. Edelsbrunner and J. Harer: *Computational Topology: An Introduction* (AMS), (2010).  
 (2) 平岡裕章: *タンパク質構造とトポロジー: パーシステントホモロジー群入門*, 共立出版(2013).  
 (3) 平岡裕章, 西浦廉政: 日本物理学会誌「交流」, **72**(2017), 632-640.  
 (4) HomCloud. [https://www.wpi-aimr.tohoku.ac.jp/hiraoka\\_lab/homcloud/](https://www.wpi-aimr.tohoku.ac.jp/hiraoka_lab/homcloud/)  
 (5) CGAL. <http://www.cgal.org>  
 (6) T. Kaczynski, K. Mischaikow and M. Mrozek: *Computational Homology*. Springer, (2004).  
 (7) 平岡裕章: データに潜む幾何構造~パーシステントホモロジー~, 数理科学2015年6月号, サイエンス社.  
 (8) Y. Hiraoka, T. Nakamura, A. Hirata, E. G. Escolar, K. Matsue

and Y. Nishiura: PNAS, **113**(2016), 7035-7040.  
 (9) E. G. Escolar and Y. Hiraoka: *Optimization in the Real World—Towards Solving Real-World Optimization Problems—*, Mathematics for Industry, Springer (2015), 79-96.  
 (10) T. Ichinomiya, I. Obayashi and Y. Hiraoka: *Phys. Rev. E*, **95**(2017), 012504.  
 (11) M. Saadatfar, *et al.*: *Nature Communications*, **8**(2017), 15082. DOI: 10.1038/ncomms15082.  
 (12) M. Kimura, I. Obayashi, Y. Takeichi, R. Murao and Y. Hiraoka: *Scientific Reports*, **8**(2018), 3553.  
 (13) I. Obayashi, Y. Hiraoka and M. Kimura: *J Appl. and Comput. Topology*, **1**(2018), 421-449.  
 (14) H. Adams, T. Emerson, M. Kirby, R. Neville, C. Peterson, P. Shipman, S. Chepushtanova, E. Hanson, F. Motta and L. Ziegelmeier: *JIMR*, **18**(2017), 218-252.  
 (15) G. Kusano, K. Fukumizu and Y. Hiraoka: *Proceedings of the 33rd International Conference on Machine Learning*, New York, NY, USA, (2016). *JMLR: W&CP*, **48**(2016), 2004-2013.

★★

平岡裕章

2005年 大阪大学大学院基礎工学研究科博士課程修了  
 2011年 九州大学マシフォアインダストリ研究所・准教授  
 2016年 東北大学材料科学高等研究所・教授  
 2018年4月- 現職

専門分野: 応用トポロジー, トポロジカルデータ解析  
 ©応用トポロジーの理論研究および材料科学や生命科学への応用研究に従事.

★★



平岡裕章



大林一平

# スペクトル解析のための 統計的機械学習

志賀元紀<sup>\*,\*\*,\*\*\*</sup>

## 1. はじめに

物質・材料科学において新たに合成された試料の構造や特性を評価するために、電子顕微鏡などの様々な計測機器が用いられる。例えば、試料の微細構造を評価するために、走査透過型電子顕微鏡の計測の HAADF-STEM (High-Angle Annular Dark-Field-Scanning Transmission Electron Microscopy) 法を用いれば、原子番号1.4~2乗に比例する強度の実空間濃淡画像が観測される。この計測法では、2次元の実空間画像が得られるため、研究者が目で見て判断するには非常に優れている。しかしながら、試料を透過した電子線のある一定の領域で積分して得たものであるために、その他の情報が損失している。これに対して、電子線の試料透過によるエネルギー損失の分光計測である EELS (Electron Energy-Loss Spectrum) 法を2次元の試料平面上で計測する STEM-EELS 法は、平面上の各点で多数の帯域からなるスペクトルを直接計測できるため、より多くの情報を得られる。しかしながら、そのデータ量のため研究者が直接チェックすることが難しかったり、雑音との明瞭な区別がつかないなどの問題がある。この問題を解消するためには、データ解析の自動化や定量評価が必要不可欠であり、昨今、研究のみならず産業界で注目が集まっている人工知能・統計的機械学習<sup>(1)(2)</sup>によるアプローチが期待される。ところで、機械学習と人工知能の明確な言葉の区別が不明瞭な記事が多いように思われる。本稿では、データから規則発見やタスク遂行のためにシステムを学習する手法を(統計的)機械学習といい、一方、学習後にタスク遂行のために利用するシステムを人工知能ということにする。

人工知能は、膨大な数のデータを利用でき、かつ、ゴールが明確なタスクに対して優れた性能を発揮することがいくつかの実応用で実証されている。それでは、研究者が何も考え

ることなく、人工知能のみを用いて、科学研究や製品開発をできるものだろうか？ これに対する前向きな回答は現状難しい。主な理由は2つある。第1の理由は、研究対象は新規・未知の事象であり、利用可能なデータが限られることである。第2の理由は、目標が必ずしも明確でなく、目標や問題設定自体の創発が研究活動に求められることである。このような理由で、人工知能に全てを任せることはできないものの、研究者自身が優れたセンスをもって、背後にあるモデルおよび仮定を構築し、その検証を達成するための論理構築およびデータ収集すれば、有益なシステムとして利用できる。これは素晴らしい研究を行うために必要なことと同じである。つまり、昨今データ解析技術が発達しているものの、研究者自身の理解がその性能を最大限に発揮するために非常に重要なポイントでもある。本稿で扱うスペクトル解析<sup>(3)-(6)</sup>の問題においても、解析対象の背後にある物理・化学的な理論とデータ解析で仮定されるモデルを理解することが、適切なデータ解析を行うために非常に重要である。

本解説では、電子顕微鏡等の分光計測スペクトルを対象としたデータ解析法をいくつか紹介する。一言にスペクトル解析といっても、膨大な数のスペクトルを網羅的に計測できる状況もあれば、限られた実験条件における少数のスペクトルしか得られない状況もある。また、理論的または経験的にスペクトル形状に関するモデルを知らない場合があれば、それらのモデルを知っており解析に利用できる場合もある。このように、計測条件および解析対象によって様々な状況が存在するものの、全ての状況に対して最適なデータ解析・機械学習法は存在しない。そこで、研究者自身が状況に応じて適切な手法を選択することが、スペクトル解析によって適切な結論を導くために必要不可欠である。もし、この選択を誤ると、せっかく取得したデータが台無しになる恐れがある。本稿では、スペクトル解析アプローチを状況に基づき分類し、代表的な解析手法とその背後にあるモデルを述べる。

\* 岐阜大学工学部；准教授(〒501-1193 岐阜市柳戸1-1)

\*\* 科学技術振興機構さきがけ研究者

\*\*\* 理化学研究所革新知能統合研究センター；客員研究員

Statistical Machine Learning for Spectral Data Analysis; Motoki Shiga<sup>\*,\*\*,\*</sup>(\*Faculty of Engineering, Gifu University, Gifu. \*\*Japan Science and Technology Agency, Saitama. \*\*\*Center for Advanced Intelligence Project, RIKEN, Tokyo)

Keywords: *statistical machine learning, multivariate analysis, unsupervised learning, spectrum imaging, scanning transmission electron microscopy with electron energy loss spectroscopy*

2018年9月3日受理[doi:10.2320/materia.58.23]

## 2. 計測スペクトルのピーク関数フィッティング

本節では、スペクトルのピーク形状が理論的あるいは経験的に知られている場合の解析法を述べる。この状況は、例えば、ラマン分光計測スペクトルのピーク形状が単峰性の関数（ローレンツ関数やガウス関数）で近似できる場合である。ピークの個数が複数である場合、複数のピーク関数の線形和によって、計測スペクトルがモデル化される（図1）<sup>(7)(8)</sup>。スペクトル帯域  $t$  での計測スペクトル  $y(t)$  のモデル  $\hat{y}(t, \theta)$  は、ピーク数  $K$ 、 $k$  番目のピークの中心位置  $\mu_k$  と幅  $s_k$  の単峰性関数  $f_k(t, \mu_k, s_k)$  およびその高さ  $w_k$  としたとき、

$$\hat{y}(t, \theta) = \sum_{k=1}^K w_k f_k(t, \mu_k, s_k) \quad (1)$$

と記述される。ただし、 $\theta$  は全パラメータ（全てのピークの中心、幅、高さ）をまとめたベクトルである。ピーク個数が既知の場合、 $K$  を固定して、モデル  $\hat{y}(t, \theta)$  の計測スペクトル  $y(t)$  へのフィッティング誤差（平均二乗誤差）

$$J(\theta) = \sum_{t=1}^T \{\hat{y}(t, \theta) - y(t)\}^2 \quad (2)$$

の最小化によってパラメータ  $\theta$  を学習する。ただし、 $T$  はスペクトル帯域数である。一般に学習問題の解析的な解を得られないので、勾配法などの逐次最適化アルゴリズムによって学習される。様々な実験条件・時刻で計測されたスペクトルが複数あれば、各スペクトルに対してパラメータ  $\theta$  を学習して比較することで、物理量の変動や推移を調べることができる。

ところで、多数の実験条件でスペクトル計測する状況では、ピーク数  $K$  が条件によって変動することがあり、その場合には計測データからピーク数  $K$  を推定する必要がある。

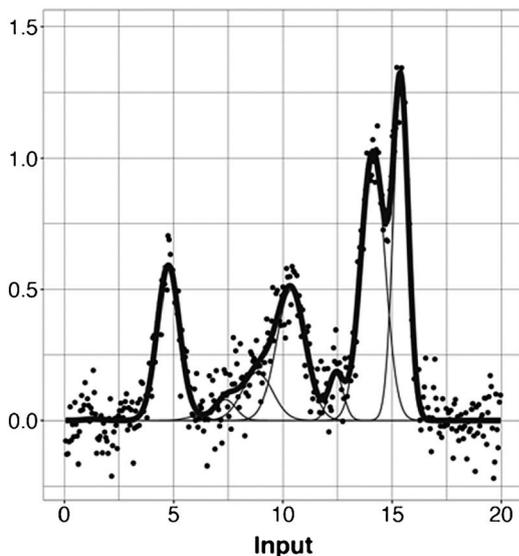


図1 スペクトルのピーク関数フィッティング（点：観測スペクトル，細線：学習後の単峰性関数，太線：学習後のモデル）。

る。しかしながら、ピーク数  $K$  の推定のために平均二乗誤差  $J(\theta)$  を最小化するアプローチを使えない。なぜなら、ピーク数  $K$  を大きくすると雑音成分にモデルが過剰フィッティングし、平均二乗誤差をいくらでも小さくできるからである。この問題に対して、ベイズ学習が有効であることが知られる<sup>(7)</sup>。

スペクトル解析において、ピーク形状以外にも、既知の観測過程をモデル化できる場合がある。例えば、注目点だけでなく、実空間の隣接位置の構造特性が計測スペクトルに混合される過程のモデルである（図2）。この状況では、計測スペクトルをピーク関数で単純にフィッティングするのではなく、混合前の純粋な特性スペクトルを推定する逆問題を解くことで、より正確な解析結果を導ける。具体的に、著者らは、試料の深さ方向に焦点を変えながら計測する3Dラマン分光スペクトル計測に対する解析法を開発した<sup>(9)</sup>。問題の単純化のために、単峰性ピークのスペクトル ( $K=1$ ) を仮定する。深さ方向の焦点距離を離散的に  $D$  個に区切れば、深さ  $d$  での観測スペクトル  $y_d(t)$  は以下のように

$$\hat{y}_d(t, \theta) = \sum_{i=1}^D c_{i,d} w_i f_i(t, \mu_i, s_i) \quad (3)$$

とモデル化される。ただし、係数  $c_{i,d}$ 、 $d=1, \dots, D$ 、 $i=1, \dots, D$  は、深さ  $i$  でのスペクトルが深さ  $d$  でのスペクトルに混合する大きさである。また、ピーク位置  $\mu_i$  および幅、 $s_i$  の関数  $f_i(t, \mu_i, s_i)$  は深さ  $i$  での純粋な成分スペクトルである。ここで、混合係数が理論的あるいは実験的に決定されているものとする。この場合、2乗誤差

$$J(\theta) = \sum_{d=1}^D \sum_{t=1}^T \{\hat{y}_d(t, \theta) - y_d(t)\}^2 \quad (4)$$

を最小にするようにパラメータ  $\theta$  を学習することによって、直接計測できない層ごとのスペクトルを推定できる。

この節を締めくくるにあたり、ピーク形状が既知の状況に関数モデルを用いる利点を述べる。1つ目の利点は、無数にあるスペクトル形状から当てはめるべき形状をあらかじめ絞り込めることである。この絞り込みによって、フィッティング問題が格段に易しいものとなり、少数あるいは1つのスペクトルしか観測できない状況でもデータ解析が可能となる。ただし、誤った関数モデルを用いると誤った結論を導く

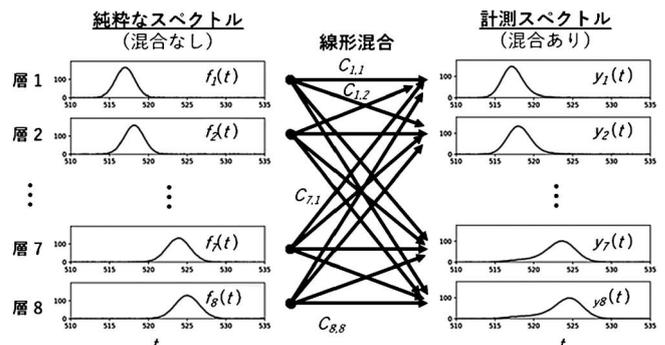


図2 3Dラマン分光計測における線形混合モデル。

ので、フィッティング結果をプロットして注意深く確認することを忘れずに行うべきである。2つ目の利点は、ピーク関数のパラメータが形状と対応するため、結果を解釈しやすいことである。通常のピーク関数は、ピークの中心位置、幅、高さの3つのパラメータで特徴付けられる。フィッティングによってこれらのパラメータが定まるため、実験条件ごとに学習されたパラメータを比較すれば、解析で知りたい情報を得られる。

### 3. スペクトル解析のための教師なし学習法

前節と異なりピーク形状に関する知識がない、あるいは、単純な関数モデルで記述できない場合の解析法を述べる。この場合、無数のスペクトル波形の候補からデータに最も適合するスペクトル波形を推定する必要があるため、前節のフィッティング問題より格段に難しい問題を扱うことになる。したがって、少数のスペクトルしか計測できない状況では適合するスペクトル波形を絞り込むことは困難であるが、膨大な数のスペクトルを計測できれば、関数モデルがない場合でもフィッティング問題を解くことは可能である。幸いにも、走査透過型電子顕微鏡などの機器を用いれば、注目領域をグリッド状に細分化した各地点( $x, y$ )でスペクトルを計測できて膨大な数のスペクトルを得られる。この計測データはスペクトラムイメージとよばれる。例えば、STEM-EELSやSTEM-EDXの標準的なデータのサイズは、スペクトル帯域数2,000に対して、試料平面グリッド上の点数 $100 \times 100 = 10,000$ という非常に大きな本数のスペクトルである。こうした状況では、関数モデルがなかったとしてもスペクトル解析が可能であり、有限個の成分(化学成分、電子状態)のスペクトルおよび成分濃度の実空間分布を推定できる。本節で紹介する手法は、化学成分に関する情報を使用せず、計測データのみを用いて解析するため、機械学習における教師なし学習のアプローチに分類される。

ところで、スペクトラムイメージ計測データは、実空間の計測地点に番号をつけて $n=1, \dots, N$ として計測スペクトルを並び替えると、サイズ $N \times T$ のデータ行列 $\mathbf{X}$ に全データを格納できる。つまり、行列 $\mathbf{X}$ の各行は1地点での計測スペクトルを表す。以降では、スペクトラムイメージがデータ行列 $\mathbf{X}$ で与えられているものとする。

#### (1) クラスタ解析

クラスタ解析とは、記述子で特徴づけられた観測標本をクラスタ(グループ)に分ける解析である(図3)。計測スペクトルの記述子を各スペクトル帯域での強度とすれば、各スペクトルは、帯域数 $T$ の次元の記述子空間中の1点に対応付けられる。この記述子空間上で近いデータ点の集まりがクラスタとなるため、同じ帯域でピークのあるスペクトルは同じクラスタに含まれる。そこで、各クラスタはピーク位置が類似する物理的に意味のある成分の集合とみなせる。クラスタ内の中心点を計算すれば、クラスタの代表スペクトルが得ら

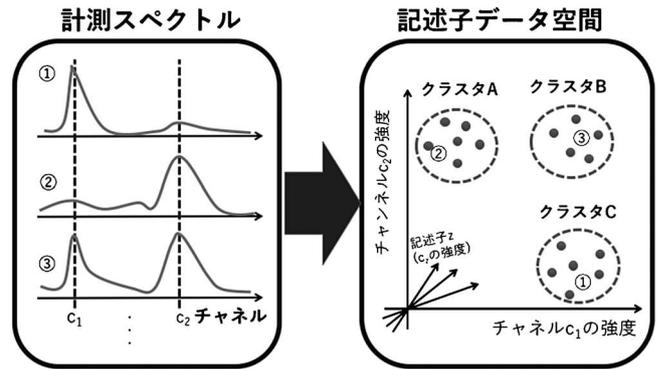


図3 記述子データ空間の構成およびクラスタ解析の概念図。

れ、対応する成分のスペクトルとみなせる。

クラスタ解析の代表的な手法は $k$ -平均法( $k$ -means)である。 $k$ -平均法のアルゴリズムは、各スペクトルのクラスタ割当てと代表スペクトルの計算を収束するまで交互に実行するものである。クラスタの代表スペクトルは、通常、クラスタに属するスペクトルの平均値によって計算される。また、各スペクトルは最も類似する代表スペクトルに対応するクラスタに割当てられる。 $k$ -平均法は、各スペクトルを1つのクラスタに割り当てるため、ハードクラスタリングと呼ばれる。

#### (2) 成分分析

前述のクラスタ解析では、各計測スペクトルに1つのみの成分が含まれることが仮定される。これに対して、成分分析では、複数の成分が含まれる状況を仮定しており、計測スペクトルは成分スペクトルと成分濃度の線形結合でモデル化される。つまり、計測地点 $n$ 、スペクトル帯域 $t$ での計測スペクトルは、 $k$ 番目の成分濃度 $C_{nk}$ と成分スペクトル $S_{tk}$ を用いて、

$$\hat{X}_{nt} = \sum_{k=1}^K C_{nk} S_{tk} \quad (5)$$

と記述される。ただし、 $K$ は成分数である。一見すると、式(1)と類似したモデル式であるが、スペクトル波形が特定の関数となっておらず、帯域毎に自由に値を設定できるのが本モデルの特徴である。このモデルは関数形が定まっていないため、ノンパラメトリックモデルとよばれる。

サイズ $N \times K$ の成分濃度行列 $\mathbf{C}$ 、サイズ $T \times K$ の成分スペクトル行列 $\mathbf{S}$ とすれば、式(5)は、

$$\hat{\mathbf{X}} = \mathbf{C}\mathbf{S}^T \quad (6)$$

と行列で記述される。一般的に $K \ll \min(T, N)$ が成り立つ。この解析は、データ行列を要素数の少ない2つの行列に分解することに相当するため、行列分解とも呼ばれる。計測データが与えられたときに行うべきことは、各成分のスペクトル $\mathbf{S}$ と各計測点での各成分の濃度 $\mathbf{C}$ を推定することであり、この推定は再構成誤差を最小にするように行われる。 $\mathbf{S}$ と $\mathbf{C}$ に何も制約がない場合、解の自由度が高すぎて、解が定まらなかったり、物理的に不自然な解析結果を導く恐れが

あったりするため、通常、何らかの制約が課せられる。課せられる制約はもちろん解析結果に影響を与えるため適切に選ぶ必要がある。本節では、スペクトル解析に使用される成分分析の代表的な手法を紹介する。

### (a) 主成分分析

主成分分析(Principal Component Analysis)は、多変量解析(複数の観測変数を統計的に扱う分野)において最も有名な手法の一つであり、高次元データを低次元空間に射影しデータ次元を削減する手法として知られる。主成分分析は、データ分布を多次元正規分布でモデル化してフィッティングするものであり、分散が大きい方向ベクトルで張られる低次元部分空間を重要な成分からなる空間と推定し、ここにデータが射影される。一方、残りの分散の小さいマイナーな部分空間は雑音成分からなる空間と推定され除外される。射影される低次元空間の座標軸は互いに直交するように選ばれるので、この直交制約が主成分分析の制約である。主成分分析をするためには、まず、全スペクトルの平均ベクトル  $\boldsymbol{\mu}$  が原点と一致するようにデータ行列の各行(各観測スペクトル)を  $\bar{\mathbf{X}}_n = \mathbf{X}_n - \boldsymbol{\mu}$  と平行移動する。そして、直交制約の下で平均2乗誤差

$$J(\mathbf{C}, \mathbf{S}) = \sum_{n=1}^N \sum_{t=1}^T (\mathbf{x}_{nt} - [\mathbf{C}\mathbf{S}^T]_{nt})^2 \quad (7)$$

を最小する行列  $\mathbf{C}$  と  $\mathbf{S}$  を行列  $\bar{\mathbf{X}}$  の特異値分解  $\bar{\mathbf{X}} = \mathbf{U}\mathbf{D}\mathbf{V}^T$  によって求める。特異値分解後の行列を  $K$  列目まで取り出した  $(\mathbf{U})_K, (\mathbf{V})_K$  によって、成分濃度行列  $\mathbf{C} = (\mathbf{U})_K$  および成分スペクトル行列  $\mathbf{S} = (\mathbf{V}\mathbf{D})_K + \mathbf{M}$  が得られる。ただし、行列  $\mathbf{M}$  は平均ベクトル  $\boldsymbol{\mu}$  を  $K$  列並べたサイズ  $T \times K$  の行列である。特異値分解の制約より行列  $\mathbf{U}$  と  $\mathbf{V}$  は正規直交である。つまり、内積が単位行列になる ( $\mathbf{U}^T\mathbf{U} = \mathbf{I}$  および  $\mathbf{V}\mathbf{V}^T = \mathbf{I}$  が成立する)ため、主成分分析で得られる行列  $\mathbf{C}$  も直交行列となることに注意されたい。上記の別解法として、共分散行列  $\boldsymbol{\Sigma} = \mathbf{U}^T\mathbf{U})N$  の固有値問題を解くアプローチがある。その詳細については紙面の都合上省略するが、興味のある方は文献(1)の12章を参考にさせていただきたい。

主成分分析は、局所解に陥ることなく2乗誤差を最小にする行列  $\mathbf{C}$  と  $\mathbf{S}$  を一意に求められるメリットがある。しかしながら、行列  $\mathbf{C}$  と  $\mathbf{S}$  の値に範囲の制約がないため、その要素が負の値となる物理的に不自然な解析結果を導く可能性がある。また、分解後の行列に直交制約を課すため、同定すべきデータが直交しない場合に誤った結果を導く。EELS スペクトルの解析では、ある電子状態に起因するスペクトルは、特定帯域のピークのみでなく高エネルギー側に強度が継続するポストエッジを含むため、スペクトルが成分間で直交せず、正しい分解結果を得られない可能性が高い。こうしたデメリットがあるため、主成分分析のみを用いて成分濃度と成分スペクトルを同定する解析は難しい。そこで、解析対象に由来するスペクトル成分と雑音成分を分離し、雑音成分を除去する処理に主成分分析を使用するのが適切と考えられる。

### (b) 頂点成分分析

主成分分析を用いれば、高次元の記述子空間の中に分布す

るデータの低次元部分空間を同定できる。しかしながら同定された低次元空間の各軸は、前述したように同定したい成分と対応するとは限らない。この問題を解決するために、低次元空間に計測データを射影した後に純粋な成分スペクトルを推定する頂点成分分析(Vertex Component Analysis)が提案されている<sup>(10)</sup>。

頂点成分分析は、 $i$  番目の空間位置での計測スペクトル  $\mathbf{X}_i$  と純粋な成分スペクトル  $\mathbf{S}_k, k=1, \dots, K$  との間に以下の関係式

$$\mathbf{X}_i = \sum_{k=1}^K C_{ik} \mathbf{S}_k^T = \gamma \sum_{k=1}^K A_{ik} \mathbf{S}_k^T \quad (8)$$

が成り立つことを利用する。ただし、 $A_{ik}$  はゼロ以上かつ  $\sum_{k=1}^K A_{ik} = 1$  が成り立つ成分濃度比を表し、また、 $\gamma$  はスケール因子である。式(8)より、計測スペクトル  $\mathbf{X}_i$  はデータ空間において純粋な成分スペクトルから構成される凸錐(convex cone)に含まれている。スケール因子  $\gamma$  を取り除くために、平均ベクトルとの内積が1となるようにデータを正規化すれば、純粋な成分スペクトルを頂点とする単体(simplex)に各計測スペクトル  $\mathbf{X}_i$  が含まれることになる。

頂点成分分析は、この単体の頂点を探索することで純粋な成分スペクトルを同定する。具体的な頂点探索アルゴリズムや雑音が多い計測データへの対策などの工夫の詳細は文献(10)を参考にさせていただきたい。ところで、頂点成分分析は、純粋な成分スペクトルが観測データに含まれることが正確な成分同定のために必要である。したがって、原子分解能のスペクトル計測のように、成分が空間的に大きく重なる場合に正確な解析が保証されないことに注意されたい。この問題解決のために、部分空間サンプリングに基づく手法が提案されている<sup>(11)</sup>。

### (c) 非負値行列分解

前述したとおり、主成分分析で同定される成分濃度行列  $\mathbf{C}$  と成分スペクトル行列  $\mathbf{S}$  は負の値になりうる。物理的な意味合いを考えれば、これらの行列の要素値はゼロ以上であり、負の値となるべきでない。非負値行列分解は、あらかじめ行列  $\mathbf{C}$  と  $\mathbf{S}$  の要素値を非負に制約して、再構成誤差を最小化するように行列分解する手法である。データ行列  $\mathbf{X}$  にも非負値性を仮定するが、バックグラウンド成分除去などの前処理に起因して負値が現れる場合が発生する。その場合には、通常、行列  $\mathbf{X}$  の負の値をゼロに置き換えて解析される。非負値行列分解における最適化は、主成分分析の場合と異なり解析解を得られないため、再構成誤差を小さくするように逐次最適化アルゴリズムが用いられる。その最適化アルゴリズムは行列  $\mathbf{C}$  と  $\mathbf{S}$  を交互に更新するのが一般的であり、代表的なものとして、行列積による更新則によって行列単位に更新する手法<sup>(12)</sup>、二乗誤差関数の勾配をゼロとする線形方程式を解いた後に負値をゼロとおき更新する Alternating Least Squares (ALS)法<sup>(13)</sup>、列ベクトル毎に行列を更新する Hierarchical ALS (HALS)法<sup>(14)</sup>などが提案されている。

基本的な非負値行列分解は単純な制約しか課さないで、

実用的にいくつか問題がある。著者らは STEM-EELS データを解析する場合に実用的に重要な 2 つの拡張を施した手法を提案している<sup>(15)</sup>。1 つ目の拡張は、非負値行列分解で得られる行列  $\mathbf{C}$  と  $\mathbf{S}$  がスパースになる傾向があり、不自然な分解結果になる問題を回避するためのものである。EELS スペクトルの解析において、成分濃度行列  $\mathbf{C}$  は成分間で重なりが少なくスパースになる傾向があるものの、本来の EELS スペクトルはスパースでないため、行列分解によって得られるスペクトルの形が物理的に不自然になる傾向がある。この問題を解決するため、我々の提案した非負値行列分解 (SO-NMF)<sup>(15)</sup> では、成分濃度行列  $\mathbf{C}$  が直交 (スパースかつ成分重なりが少ない) になるようにソフト直交制約の罰則項を加えた目的関数を新たに導入し、この最適化によって行列分解を行う。この結果として得られる成分濃度行列  $\mathbf{C}$  がよりスパースになり、一方で、スペクトル行列  $\mathbf{S}$  が非スパースに最適化されることによって自然な分解結果を得られる。

2 つ目の拡張は、成分数  $K$  の自動選択である。成分数は間違った値に設定されると誤った結論を導くために、計測データから自動的に決定できることが望ましい。我々の論文<sup>(15)</sup> では、Automatic Relevance Determination (ARD) 事前分布<sup>(16)</sup> に基づく罰則項を導入し、成分数を計測データから学習するアプローチをとった。これら 2 つの拡張を施した行列分解法 (ARD-SO-NMF) は、通常平均 2 乗誤差に加えて、ソフト直交制約の罰則項および ARD に関する罰則項を加えた目的関数の最小化によって、成分濃度行列  $\mathbf{C}$  と成分スペクトル行列  $\mathbf{S}$  を最適化する。この最適化を具体的に行うために、HALS 法に基づくアルゴリズムを新たに導出した。本開発の実行ソフトウェアは著者の GitHub レポジトリ<sup>(17)</sup> において公開されているので、興味のある方は参考にいただきたい。

### (3) STEM-EELS データの解析

実際の STEM-EELS スペクトラムイメージを解析した。解析したデータは半導体メモリ素子の断面試料に対し、1 ステップ 5 nm、各点から 0.1 eV/チャンネルで EELS を取得した後に、試料バックグラウンド成分を除去し、シリコンの  $L_{2,3}$  吸収端 ELNES を取り出したものである。図 4 は、この試料の計測領域における成分の参照分布と参照スペクトルである。このデータには 3 つの成分が含まれており、それら

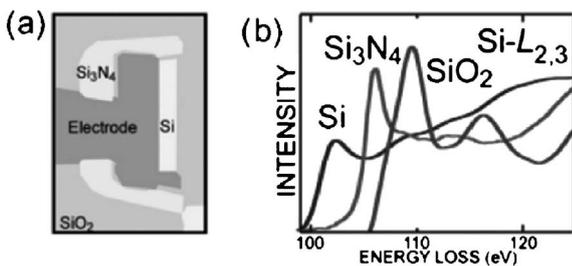


図 4 半導体メモリ素子 STEM-EELS データにおける (a) 成分の参照分布と (b) 参照スペクトル。

の空間分布は成分ごとに明確に分かれている。したがって、解析結果として得られる成分濃度行列  $\mathbf{C}$  が直交行列になることが期待される。一方、参照スペクトルは成分毎に特徴的なピーク形状を示すが、多くの帯域で非ゼロ値となりスパースでも直交でもない。

図 5—図 8 に主成分分析、頂点成分分析、非負値行列分解、ソフト直交制約付き非負値行列分解 (SO-NMF) による行列分解の結果をそれぞれ示した。主成分分析の結果である図 5 (a) から空間的に成分が分離されていないことが分かる。また、得られた成分スペクトルは参照スペクトルと異なり不自然に落ち込む形状をしている。図 6 に示された頂点成分分析の結果は、得られた成分スペクトルが自然な形状をしており、成分 1 ( $\text{Si}_3\text{N}_4$ )、成分 2 (Si)、成分 3 ( $\text{SiO}_2$ ) の全てが主成分分析の結果より正確に同定できていることが分かる。計測されたスペクトラムイメージ中に純粋な成分スペクトルが存在しており、これらを正確に同定できたといえる。また、図 7 より、非負値行列分解の結果は、主成分分析の結果

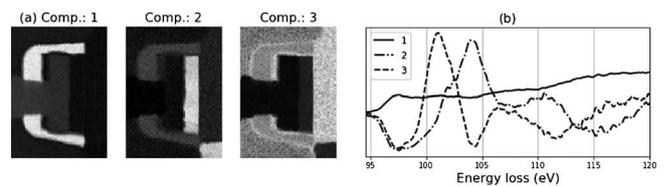


図 5 主成分分析による分解結果 (a) 成分濃度分布と (b) 成分スペクトル。

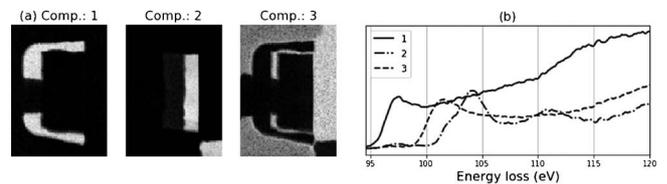


図 6 頂点成分分析による分解結果 (a) 成分濃度分布と (b) 成分スペクトル。

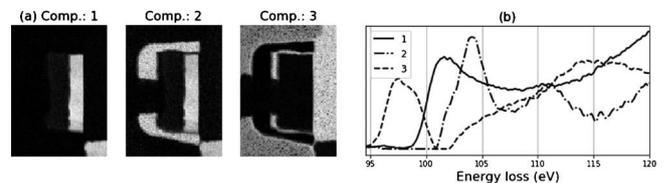


図 7 非負値行列分解による分解結果 (a) 成分濃度分布と (b) 成分スペクトル。

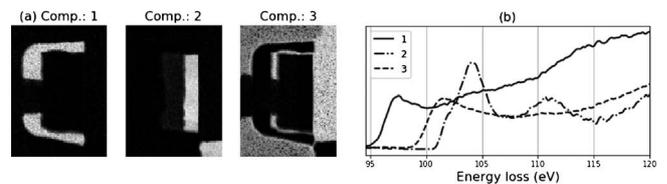


図 8 ソフト直交制約付き非負値行列分解 (SO-NMF) による分解結果 (a) 成分濃度分布と (b) 成分スペクトル。



# 材料工学における数学，情報工学への 更なる期待

足立 吉 隆<sup>1)</sup> Zhi-Lei Wang<sup>2)</sup>

## 1. 緒 言

材料開発には時間を要する「作業」があまりにも多すぎる。無用な絨毯爆撃の実験，組織写真中の対象領域の手動色塗り，結晶粒径・体積率などの手動評価，複雑系での実験結果の傾向把握などは時間を要する作業となっており，それらを効率化することにより研究者，技術者はクリエイティブな思考に時間をより一層割くことができるようになるであろう。機械学習は，これらの効率化，推定，解析のいずれの点でも活用でき，研究開発の生産性向上に向けて積極的に導入されるべきである。機械学習をその特徴から大別(図1)すると，教師あり学習，教師なし学習，強化学習に分けることができる。以下では，すでに使われている方法もあれば，まだ利用されていない方法もあるが，材料工学への適用への期待を込めて所感を述べたい。なお，本稿では，物質探索ではなく，材料開発における数学および情報工学の適用に関する著者の考えを述べさせていただきたい。

## 2. 推 定

複雑系におけるプロセス→組織→特性の関係を表現する精度の良い順解析モデル(direct analysis)を，背後にある

メカニズムの解明と並行して，構築したい。そして，この順解析モデルを使って逆解析(inverse analysis)し，特性→組織→プロセスの提案を行って材料開発を効率的に加速したい。このような場面には機械学習の教師あり学習が有用である。

順解析モデルは二つに大別<sup>(1)</sup>され，入力-出力の関係を表現する理論式のパラメータ(係数やべき指数)を線形関数で推定するパラメトリック法，非線形の関数を組み合わせて入力-出力の関係を究極的な近似式で表現するノンパラメトリック法がある。単純系でデータノイズが小さい場合には物理的背景がある理論式の精度を向上することにつながるパラメトリック法が優先して用いられるべきであり，一方複雑系でデータノイズが大きい場合にはノンパラメトリック法がパラメトリック法よりも精度が優れる場合がある。ノンパラメトリック法はパラメータで式を表現しない究極的な近似モデルといえ，その利用をためらう意見もあるが，最終手段として活用し，解析手法の候補から排除するべきではないというのが著者の主張である。

パラメトリック法は，最尤法でパラメータを推定する一般線形モデル General linear model(lm)，一般化線形モデル Generalized linear model(glm)と，事後確率を最大化する方法でパラメータを推定するマルコフ連鎖モンテカルロ法(MCMC)がある<sup>(1)</sup>。データは通常ノイズを含んでおり，ポアソン分布，ガウス(正規)分布，ガンマ分布などの確率密度

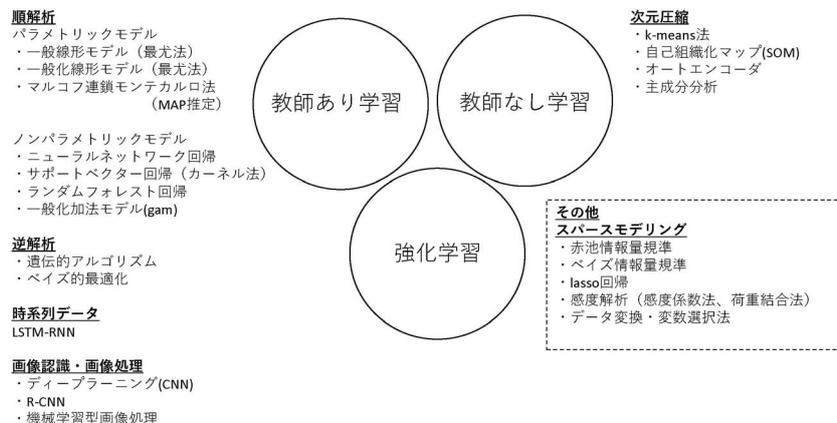


図1 機械学習の3大分野.

\* 名古屋大学大学院工学研究科材料デザイン工学専攻: 1)教授 2)研究員(〒464-8603 名古屋市千種区不老町)  
Further Expectation of Mathematics and Information Engineering in Material Science and Engineering; Yoshitaka Adachi and Zhi-Lei Wang (Nagoya University, Graduate School of Engineering, Department of Material Design Innovation Engineering, Nagoya)  
Keywords: materials informatics, descriptor, parametric model, non-parametric model, inverse analysis, sparse modelling, deep learning  
2018年8月21日受理[doi:10.2320/materia.58.29]

関数と、尤度や事後確率などの統計学に関する基礎知識が必要である。ノンパラメトリックな手法としては、最も簡単なのは、一般化加法モデル (Generalized additive model (gam)) であり、これは非線形関数でプロットをつなげて曲線を描く手法である。そのため、明示的に数式では表現できないが、線形モデルよりも一般的に精度がよい。さらに入力層と出力層の間に中間層(隠れ層という場合もある)を入れて表現力を増したのが、ニューラルネットワーク (artificial neural network: ANN) であり、機械学習の代表的な手法と言えるであろう。その他にも非線形関係を扱う機械学習法として、カーネル法を取り入れたサポートベクター回帰 (support vector regression: SVM)、複数の決定木 (decision tree) の多数決で回帰を行うランダムフォレスト (random forest: RF) などの手法がある。ANN, SVM, RF などを識別機 (classifier) と呼ぶ。いずれの識別機にもモデル構造の詳細を表すハイパーパラメータ (例えば、ニューラルネットワークの場合には中間層中のノードの数や重み減衰率係数など) があり、精度の良い順解析モデルを作るためには、その最適化が重要である。ハイパーパラメータの最適化には、ベイズの最適化やグリッドサーチが有用である。

精度の良い順解析モデルができると、そのモデルを使って逆解析が可能となる。逆解析時に、最高出力となる条件を探索する際の入力変数の範囲は、通常順解析モデルを作った時の範囲であるが、出力は初期データの範囲外となる場合もある。最適条件の探索アルゴリズムとしては、グリッドサーチ (全探索)、遺伝的アルゴリズム<sup>(2)</sup>、ベイズの最適化<sup>(3)</sup>とあり、後者に行くほど数少ない探索で最高出力条件を見つける効率的な探索を行う。

AlphaGo<sup>(4)</sup>に象徴される、教師データを与えなくても自ら適応していくアルゴリズムである**強化学習** (reinforcement learning)<sup>(5)</sup>も、プロセス条件の最適解を求めるアルゴリズムとして魅力的である。材料工学への適用はまだこれからといったところである。強化学習では最初に多くのデータを与えるのではなく、一回の試行ごとに報酬あるいは罰を与えて、動作を良い方向に導く手法である。

初期値から未来の値を予測する Long Short-Term Memory Recurrent Neural Network (LSTM-RNN)<sup>(6)</sup>は、文脈の解析に用いられるという説明が多いようであるが、クリープや疲労などの時系列データの推定に有用であると推察される。しかしながら、まだ適用例はなく今後の進展が期待される。

### 3. 解 析

準備する入力変数(記述子ではない)は多いほど良い。しかしそのまま機械学習に入力するのではなく、次に述べる交互作用項を設けたり、重要な入力変数を選択したり、入力変数の次元を削減したりすることが重要である。

2つの記述子の相互作用が出力に影響を大いに与えている場合は、記述子は単独で与えるだけではなく、記述子同士の交互作用項を作って入力変数(記述子候補)とする場合がある<sup>(7)</sup>。

入力変数を削減し重要な記述子(交互作用項を含む)のみを

機械学習に入力することは過学習を抑制する上で極めて重要であり、スパース学習<sup>†</sup>の重要な部分といえるであろう。この記述子の重要性を機械学習で判断する手法として、赤池情報量基準 (AIC)<sup>(8)</sup>、ベイズ情報量基準 (BIC)<sup>(9)</sup>、lasso 回帰、感度係数法<sup>(10)</sup>や荷重結合法<sup>(11)</sup>による感度解析、データ変換・変数選択法<sup>(12)</sup>などがある。この入力変数を選択する方法とともに、次に述べる次元削減法も入力変数を削減する有効な方法である。

k-means 法 (図 2)<sup>(13)</sup>は、与えられた入力データだけを使って分類対象の集合を部分集合に分割する(クラスタリングという)ことが可能であり、主成分分析 (principle component analysis)、オートエンコーダー (auto encoder) などと同様に**教師なし学習**の一手法である。これらの手法は多次元情報の次元削減手法ともいえる。k-means 法の計算手順は以下のとおりである。1. 各データ  $x_i (i=1... n)$  に対してランダムに  $k$  個のクラスにクラス分けする(クラスタリング)、2. 割り振ったデータをもとに各クラスタの中心  $V_j (j=1... k)$  (平均) を計算する、3. 各  $x_i$  と各  $V_j$  との距離を求め、 $x_i$  を最も近い中心のクラスタに割り当て直す、4. 上記の処理で全ての  $x_i$  のクラスタの割り当てが変化しなかった場合、あるいは変化量が事前に設定した一定の閾値を下回った場合に、収束したと判断して処理を終了する。そうでない場合は新しく割り振られたクラスタから  $V_j$  を再計算して上記の処理を繰り返す。

k-means 法は代表点に属する近くのプロットを集めて部分集合化するだけの手法であったが、特徴量を有した状態でクラスタリングする手法としては自己組織化マップ (Self-organizing map: SOM, 図 3)<sup>(14)</sup>があり、これはニューラルネットワークの教師なし学習である。SOM の内容は以下のとおりである。

1. 入力データ  $x_{i,n}$  とニューロン  $m_{i,j,n}$  間の距離  $d$  を測定し、最小距離のニューロンを勝者ニューロンとする。

$$\min(d) = \|X_i - M_{i,j}\| = \sum_{n=1}^n (x_{i,n} - m_{i,j,n})^2$$

(例)  $M_{3,6} = (m_{3,6,1}, m_{3,6,2}, m_{3,6,n})$  を勝者ニューロンとする。

2. 勝者ニューロンを次式に従って修正する。

$$M_{3,6}^{new} = M_{3,6} + \alpha (X_i - M_{3,6})$$

$\alpha$ : 学習率 ( $0 < \alpha < 1$ )

3. 近くのニューロン(例  $M_{2,6}$ ) を修正する。

$$M_{2,6}^{new} = M_{2,6} + \alpha (X_i - M_{2,6}) \times g(e)$$

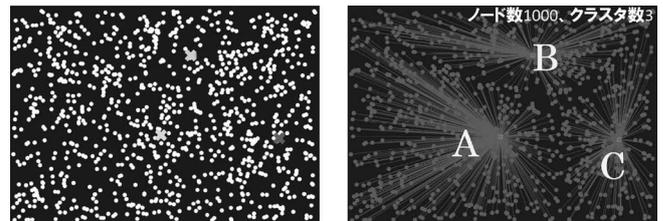


図 2 k-means 法。

<sup>†</sup> スパース学習は、データの本質的に意味のある情報の低次元性を利用し、目的に関係ない情報を削除しながら学習する方法である。

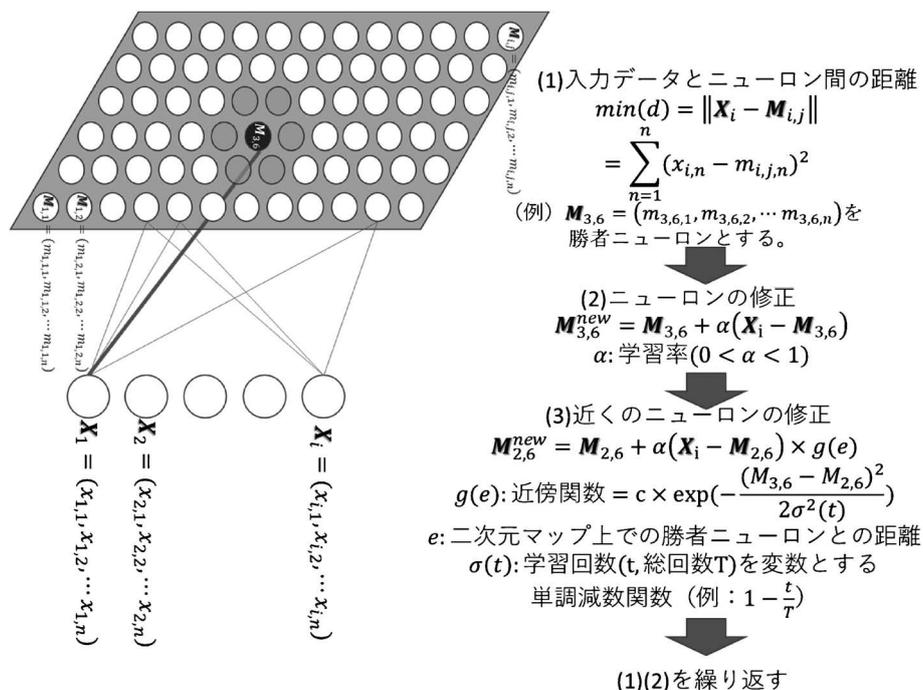


図3 自己組織化マップ.

$$g(e) : \text{近傍関数} = c \times \exp\left(-\frac{(M_{3,6} - M_{2,6})^2}{2\sigma^2(t)}\right)$$

$e$ : 二次元マップ上での勝者ニューロンとの距離

$\sigma(t)$ : 学習回数 ( $t$ , 総回数  $T$ ) を変数とする

$$\text{単調減数関数 (例: } 1 - \frac{t}{T} \text{)}$$

1~3を繰り返すことにより、位相情報が似ている入力データは自己組織化マップでは徐々に近くに集まってくるようになる。

#### 4. 効率化

異なる視点として、分析機器のユーザーフレンドリー化に機械学習法を導入することが期待される。画像もスペクトラムもその特徴量を数値化して誰でも可読な形式(例えば csv形式)で保存されることが望まれる。そしてその定量解析がワンクリックでできるように機械学習を活用することが考えられる。特徴量の定量評価には数学が活用でき、位相幾何学、微分幾何学、さらにはフーリエ変換法の発展形で階層的に潜在する連結性を評価するパーシステントホモロジー群などがすでに材料工学に適用され始めている<sup>(15)-(17)</sup>。材料工学の専門家に与えられた使命は、それぞれの分野において重要な記述子(descriptor)を設計することである。繰り返しになるが、これらの豊富な特徴量を、容易に得られるようにすることが極めて重要である。

材料組織の画像処理では、手作業で対処領域に色を塗る(segmentationあるいはlabelingという)ことに多くの時間を費やしている研究者も多いものと推察される。この作業については、深層学習(deep learning)に代表される機械学習型画像認識・画像処理は飛躍的な進展を続けており<sup>(18)(19)</sup>,

材料工学においてもっと活用されるべきと思われる。

#### 5. 材料情報統合システム

以上述べた数学手法や機械学習法を容易に材料研究者が使いこなせるような材料情報統合システムの構築が真に材料開発効率を革新的に改善するために重要である。幸い各種機械学習法のモジュールがプログラミング言語 Python や R で提供されており、材料研究者はそれらのモジュールを自由自在に組み合わせて自らの課題に適用させることが求められる。したがって今後の材料研究者はこれらのプログラミング言語の習得が不可欠になるであろう。教育現場では、これらのプログラミング言語を自由自在に使いこなせる人材を育成するためのカリキュラムの抜本的改革が期待される。

著者たちは、上述した機械学習法の大半を取り組んだ材料情報統合システム Material genome integration system for phase and property analysis(MIPHA<sup>†</sup>およびrMIPHA\_studio<sup>\*\*</sup>) (図4)を開発し、提供を始めている<sup>(20)-(22)</sup>。同時に、「統合型材料デザイン」という大学院生向けの講義を開設している。

<sup>†</sup> MIPHA: プログラミング言語 visual basic, 画像認識, 機械学習型画像処理, 定量2D/3D解析, ニューラルネットワークによる順解析, 遺伝的アルゴリズムによる逆解析が可能である。

<sup>\*\*</sup> rMIPHA\_studio: プログラミング言語 R, rMIPHA, Theory designer, Material image editorの三つのモジュールで構成される。rMIPHAはANN, SVR, RFによる順解析, ベイズ的最適化によるそれぞれの識別機を使った逆解析, スパース学習が実装されており, Theory designerは理論式のパラメトリック推定が実装されており, Material image editorは画像間の類似性評価が実装されている。



# Ti-Ni 基合金の低温における マルテンサイト変態と Intermediate 相

木村 雄太\*

## 1. はじめに

形状記憶効果および超弾性効果は、熱弾性型マルテンサイト変態 (M 変態) が現れる合金系において出現する。その中でも Ti-Ni 合金は、優れた形状記憶特性および良好な機械的特性、耐食性を有することから、現在最も実用に供されている形状記憶合金である。形状記憶合金として利用するためには M 変態温度を制御する必要があり、Ti-Ni 基合金の M 変態温度は組成に強く依存することが知られている<sup>(1)-(5)</sup>。近年、著者らは低温域において動作する超弾性合金を探索する中で、M 変態前に Commensurate-Incommensurate 転移 (C-IC 転移) が存在することを  $\text{Ti}_{50.0-x}\text{Ni}_{40.0+x}\text{Cu}_{10.0}$  合金ではじめて見出した。本稿では、Ni 組成を制御した  $\text{Ti}_{50.0-x}\text{Ni}_{40.0+x}\text{Cu}_{10.0}$  合金の低温における構造相転移、特に  $x \geq 1.4$  の組成域で M 変態前に出現する C-IC 転移に関する Intermediate 相 (I 相) についての著者らの最近の研究<sup>(6)</sup> について紹介する。

C-IC 転移は、M 変態前の母相状態が変態温度に近づくと、母相中にひずみのゆらぎとも言える変調構造等が現れるというもので、主に熱弾性型 M 変態をする合金系で見られる現象である。Ti-Ni 基の C-IC 転移は、1982年に Salamon らにより  $\text{Ti}_{50}\text{Ni}_{47}\text{Fe}_3$  合金ではじめて報告されている。B2 相から R 相に M 変態する B2/R 相変態の C-IC 転移は、電子回折図形に現れる  $1/3\{110\}_{\text{B2}}$  散漫散乱と関連して議論される<sup>(7)</sup>。C-IC 転移における IC-state は、電子回折図形において  $1/3\{110\}_{\text{B2}}$  の回折点付近のオフセット位置に現れる散漫散乱反射を特徴とし、温度の低下とともに散漫散乱反射は正確な  $1/3$  位置に観察される。このような特徴を有する C-IC

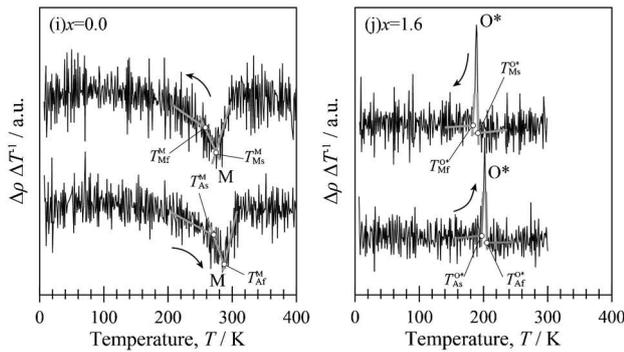
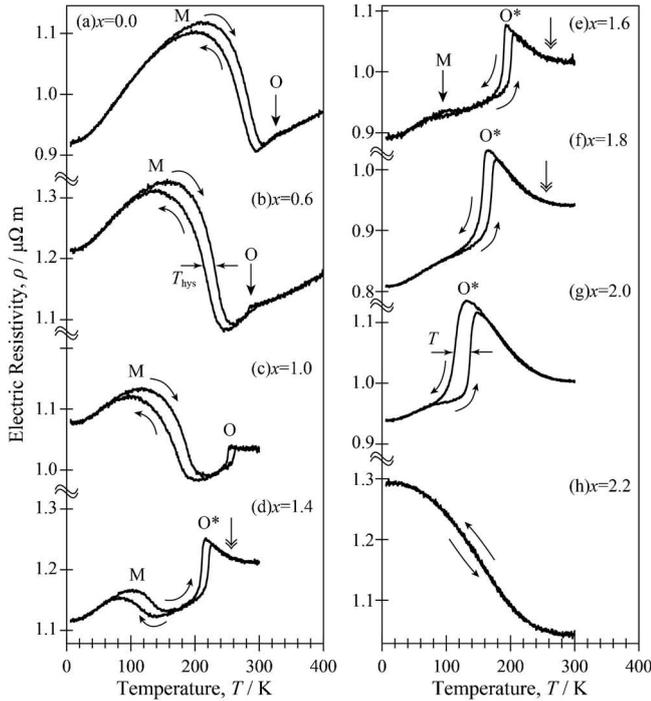
転移は、主に化学量論組成の Ti-Ni-Fe 系合金で多く報告されている<sup>(8)-(10)</sup>。 $\text{Ti}_{50.0-x}\text{Ni}_{40.0+x}\text{Cu}_{10.0}$  合金の低温における M 変態についての基礎研究を行ったところ、非化学量論組成において偶然 C-IC 転移の存在を見出した。本稿では、B2/B19, B19/B19', B2/I (C-IC 転移または中間相) および I/B19 の相転移を対象としている。

## 2. 低温におけるマルテンサイト変態

$\text{Ti}_{50.0-x}\text{Ni}_{40.0+x}\text{Cu}_{10.0}$  合金を 1373 K で 30 min 溶体化処理した試料の電気抵抗率  $\rho$  の温度依存性を図 1 に示す。図 1 の  $\rho$ - $T$  曲線から B2 相から B19 相、さらに B19' 相への二段階 M 変態は Ni = 41.6 at% ( $x = 1.6$ ) まで起きることが明らかとなった。また化学量論組成 (Ti = 50.0 at%) に近い領域では、B19/B19' 変態に伴う電気抵抗率  $\rho$  の変化を明瞭に確認できたが、Ni 組成が増大するにつれ B2/B19 変態に伴う電気抵抗率  $\rho$  の変化が増大し、B19/B19' 変態に伴う  $\rho$  の変化は減少することが明らかとなった。この  $\rho$ - $T$  曲線の振る舞いは、化学量論組成から Ni 組成を増大することで、B19/B19' 変態温度が低温側へシフトし B2/B19 変態のみが生じることに起因していると推測した。さらに  $x \geq 2.2$  になると B2/B19 および B19/B19' 変態による電気抵抗率の変化は確認できなかった。

図 2 に DSC 曲線を示す。DSC 測定の結果から、M 変態温度は Ni 組成の増大に伴い低下する結果が得られた。この結果は、前述した電気抵抗測定により決定した変態温度とよく一致していることから妥当であるといえる。また Ni = 41.2 at% ( $x = 1.2$ ) 以上では B19/B19' 変態温度は、DSC の測定限界温度 123 K 以下であることが明らかとなった。

\* 東北大学金属材料研究所 附属新素材共同研究開発センター；助教 (〒980-8577 仙台市青葉区片平 2-1-1) Martensitic Transformation and Intermediate-phase at Low Temperatures in Ti-Ni Based Alloys; Yuta Kimura (Cooperative Research and Development Center for Advanced Materials, Institute for Materials Research, Tohoku University, Sendai)  
Keywords: Ti-Ni based alloy, shape memory alloy, martensitic transformation, commensurate-incommensurate transition, entropy change  
2018年10月9日受理 [doi:10.2320/materia.58.33]



O : B2/B19 O\* : I/B19 M : B19/B19'

図1  $\text{Ti}_{50.0-x}\text{Ni}_{40.0+x}\text{Cu}_{10.0}$  合金の電気抵抗率  $\rho$  の温度依存性.

さらに  $1.2 \leq x \leq 2.0$  では 250 K 付近でブロードなピークが観察された. ここでは便宜上, 中間相 (Intermediate phase: I-phase) への変態に伴うピークと定義する. しかしながら, DSC 曲線に観察された I 相によるピークはブロードであるため変態温度の決定は困難である. 本研究では, このブロードなピークを詳細に調査するために, 高分解能 DSC を用いた熱分析を行なった.

### 3. C-IC 転移の出現と相転移相図

$x=1.2$  以上で観察されたブロードなピークの起源およびエントロピー変化 ( $\Delta S$ ) を調査するため, 定圧比熱  $C_p$  の調査を行なった. 図3に加熱過程の定圧比熱  $C_p$  の温度依存性を示す. 比熱による逆 M 変態温度は, 前述した電気抵抗および DSC により決定した M 変態温度とよく一致していることから妥当であるといえる. また I 相によるブロードなピークも

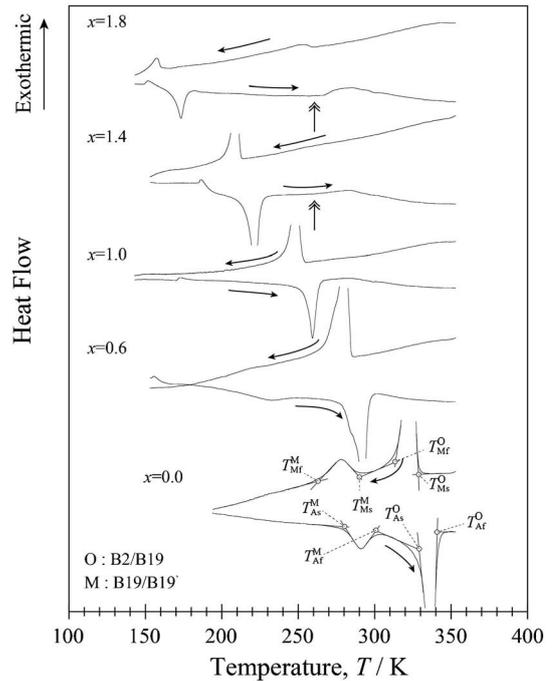


図2  $\text{Ti}_{50.0-x}\text{Ni}_{40.0+x}\text{Cu}_{10.0}$  合金の DSC 曲線.

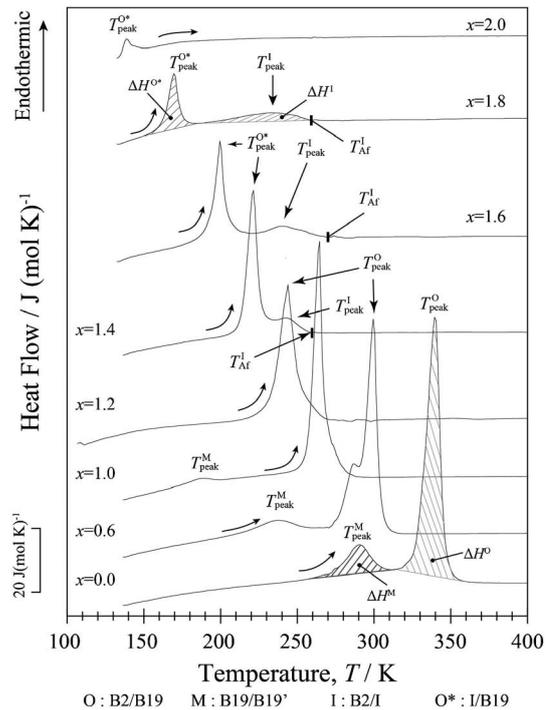


図3  $\text{Ti}_{50.0-x}\text{Ni}_{40.0+x}\text{Cu}_{10.0}$  合金の  $C_p$ - $T$  曲線.

$C_p$ - $T$  曲線に観察された. B2/B19 および B19/B19' 変態のシャープなピークと比較して, B2/I 変態のピークはブロードであることが明らかとなった.  $\text{Ti}_{50.0-x}\text{Ni}_{40.0+x}\text{Cu}_{10.0}$  合金において, 先行研究<sup>(5)(9)-(11)</sup>と同様に  $C_p$ - $T$  曲線に C-IC 転移と考えられる二次変態的なピークが観察されているが, C-IC 転移に由来するピークか判断するためには, 電子線回折図形に現れる散漫散乱による回折点,  $1/3[\zeta\zeta 0]$  位置の温度依

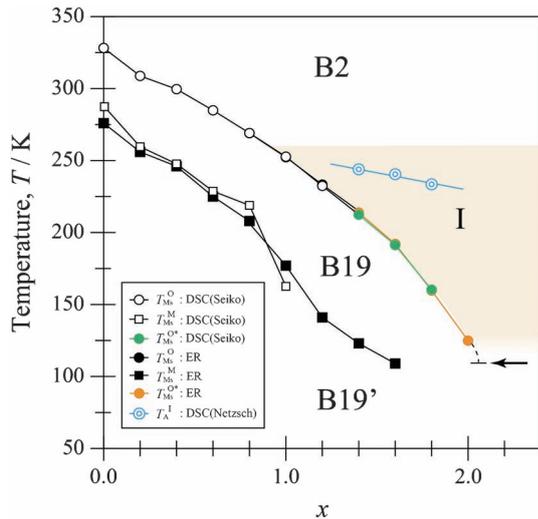


図4  $\text{Ti}_{50.0-x}\text{Ni}_{40.0+x}\text{Cu}_{10.0}$  合金の相転移温度のNi依存性。(オンラインカラー)

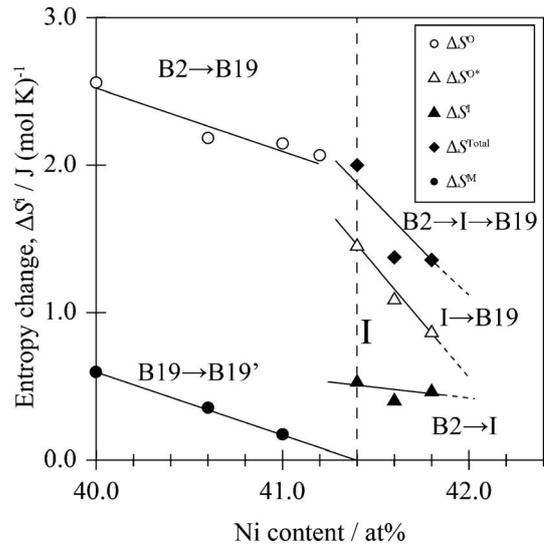


図5 エントロピー変化  $\Delta S$  のNi依存性。

存性などさらなる調査が必要である。

これらの結果をまとめた相図を図4に示す。  $T_{Ms}^O$  および  $T_{Ms}^M$  は、Ni組成の増大とともに線形的に低下する。また  $x \geq 1.4$  で出現するI相の逆変態温度  $T_A^I$  は、Ni組成の増大に対してわずかに低下する。ここでI/B19変態温度  $T_{Ms}^O$  を見ると、  $x \geq 1.4$  を境に変態温度の傾きがわずかに変化する。

#### 4. C-IC 転移の熱力学的考察

$C_p$ - $T$  曲線(図3)から算出した  $\Delta S$  のNi組成依存性を図5に示す。ここで  $\Delta S$  はM変態に伴う潜熱  $\Delta H$ (図3中の斜線で示した領域)およびM変態のピーク温度  $T_{\text{peak}}$  から、式(1)により算出した。

$$\Delta S = \Delta H / T_{\text{peak}} \quad (1)$$

$\Delta S^{\text{B19/B2}}$  および  $\Delta S^{\text{B19'/B19}}$  は、Ni組成の増加と共に減少することが明らかとなった。比熱測定で得られた結果から、Ni量が41.4 at% ( $x = 1.4$ )以上の領域ではB2母相からI相、I相からB19とI相を経由してM変態する。この  $x \geq 1.4$  での変態エントロピー変化の総和  $\Delta S^{\text{Total}}$  は、I/B2変態におけるエントロピー変化  $\Delta S^{\text{I/B2}}$  とB19/I変態におけるエントロピー変化  $\Delta S^{\text{B19/I}}$  の和 ( $\Delta S^{\text{Total}} = \Delta S^{\text{I/B2}} + \Delta S^{\text{B19/I}}$ ) で与えられる。この  $\Delta S^{\text{Total}}$  は、低Ni側の  $\Delta S^{\text{B2/B19}}$  と連続的であった。ただし、Ni=41.4 at% ( $x = 1.4$ )を境に  $\Delta S$  の傾きが変化する。なお  $x \geq 1.8$  以上は、変態点が低く測定できなかった。Ni=41.4 at% ( $x = 1.4$ )を境界とした  $\Delta S$  の傾き変化の原因については、以下の2つの可能性が考えられる。

(1) B19相の熱力学安定性がI相を経由する影響を全く受けないと仮定すれば、  $\Delta S^{\text{I/B2}} + \Delta S^{\text{B19/I}}$  は  $\Delta S^{\text{B19/B2}}$  と熱力学的に等価であり、Ni=41.4 at%を越えて連続した1本の連続した曲線で結べる。この時、M変態における  $\Delta S$  の温度(あるいは組成)変化は、必ずしも線形とは限らない。従って、  $\Delta S$  の組成依存性が、たまたま上に凸のなだらかな曲線とな

っているなら、  $\Delta S$  が折れ曲がるように見える。

(2) B19相の熱力学安定性がI相を経由する影響を受けると仮定した時、その影響の度合いが組成や変態温度に依存するならば、傾きの変化が生じる。

本結果では、41.4 at%付近において  $\Delta S^{\text{B19/B2}}$  と  $\Delta S^{\text{I/B2}} + \Delta S^{\text{B19/I}}$  がほぼ一致することから、B19相の熱力学安定性がI相を経由する影響を強く受けているとは言えず、(1)の可能性が高いと考えられる。

図6(a)に変態ヒステリシス  $T_{\text{hys}}$  のNi組成依存性を示す。図6(a)よりDSC測定の結果からB2/B19変態における  $T_{\text{hys}}$  ( $\equiv T_{\text{Af}} - T_{\text{Ms}}$ ) は、Ni組成の増加と共に約12 Kから17 Kまで徐々に広がることが明らかとなった。

そこで、M変態における  $T_{\text{hys}}$  の組成依存性について熱力学的な考察を行った。図6(b)は  $T_{\text{Ms}}$  における変態の駆動力(非化学的エネルギー項)  $\Delta G_{\text{NC}}$  および変態エントロピー変化  $\Delta S^{\text{B2/B19}}$ 、  $\Delta S^{\text{I/B19}}$  のNi組成依存性を示す。ここで  $\Delta G_{\text{NC}}$  は、熱力学的平衡温度  $T_0$  からの過冷度  $\Delta T$  ( $\equiv T_0 - T_{\text{Ms}}$ ) と変態エントロピー変化  $\Delta S$  の積で与えられ、  $\Delta T$  を  $T_{\text{hys}}$  の1/2と近似すれば次式(2)で示される<sup>(12)</sup>。

$$\Delta G_{\text{NC}} \approx \Delta T \cdot \Delta S \approx \frac{1}{2} T_{\text{hys}} \Delta S^{\text{B2/B19 or I/B19}} \quad (2)$$

図6(b)から、  $\Delta S$  はB2/B19とI/B19の境界で明確な段差を示し、  $\Delta G_{\text{NC}}$  はNi組成の増加と共に低下する。このような  $\Delta G_{\text{NC}}$  の組成依存性は、上式から、もし  $\Delta S$  が一定であればむしろ  $T_{\text{hys}}$  の減少を招いてしかるべき結果である。しかし、Ni組成の増加により  $T_{\text{hys}}$  が増大した事実から、この最大の要因は  $\Delta S$  の著しい低下にあると結論づけられる。

ここで、I相の出現によるM変態に与える影響について、各相の自由エネルギー  $G^i$  の観点から考察を行う。図7に(a)実験結果(図4参照)に基づく  $T_0$ - $x$  相図、(b)各組成において予想される自由エネルギー-温度曲線 ( $G^i$ - $T$  曲線)の模式図を示す。今回は簡単化のため、B19'相の自由エネル

ギー ( $G^{B19}$ ) は省略する.  $Ti_{50.0-x}Ni_{40.0+x}Cu_{10.0}$  合金では, I 相の平衡温度  $T_0^i$  は, Ni 組成に依存せずほぼ一定であることから, B2 相の自由エネルギー  $G^{B2}$  と I 相の自由エネルギー  $G^I$  の交点は, 組成によって大きく変わらないと言える. また  $\Delta S$  は自由エネルギー曲線の交点における傾きの差であり,  $\Delta S^{I/B2}$  は非常に小さいことから, 自由エネルギー曲線  $G^{B2}$  と  $G^I$  は似たような自由エネルギー曲線になることが予想される.

図 7 の  $x=x_1$  の組成では,  $G^{B2}$  と B19 相の自由エネルギー

$G^{B19}$  の交点の温度 ( $T=T_1$ ) が平衡温度  $T_0^i$  となる. ここで I 相が存在しない場合を考えると, 図 7(a) 中において  $T_0^i$  は点線で示すような組成依存となり,  $x=x_2$  の組成では  $G^{B2}$  と  $G^{B19}$  の交点 ( $T=T_3$ ),  $x=x_3$  の組成では  $G^{B2}$  と  $G^{B19}$  の交点 ( $T=T_5$ ) でそれぞれ  $T_0^i$  点となる. しかしながら,  $x=x_2$  の組成では I 相が現れるため,  $G^{B2}$  と  $G^I$  の交点 ( $T=T_2$ ) が  $T_0^i$  点となる. その後,  $G^I$  と  $G^{B19}$  の交点が  $T_0^{i*}$  点となる. 同様に  $x=x_3$  の組成では,  $G^{B2}$  と  $G^I$  の交点 ( $T=T_2$ ) が  $T_0^i$  点,  $G^I$  と  $G^{B19}$  の交点 ( $T=T_6$ ) が  $T_0^{i*}$  点となる. したがって, I 相の存在により  $G^I$  と  $G^{B19}$  の交点が低温側にシフトし, 結果として I 相が出現する  $x \geq 1.4$  を境に変態温度の傾きがわずかに変化する.

## 5. ま と め

本稿では  $Ti_{50.0-x}Ni_{40.0+x}Cu_{10.0}$  合金における M 変態と C-IC 転移に関する実験結果を紹介した.  $Ni \geq 41.4$  at% 以上で B2/B19 変態前に, C-IC 転移に起因する I 相が出現することを初めて見出した. 本稿では, I 相の存在が M 変態温度およびエントロピー変化 ( $\Delta S$ ) に影響を与える熱力学的に重要な相転移であることを紹介した.

これまで Ti-Ni 基合金を低温で動作する超弾性合金として利用するための研究が取り組まれてきたが<sup>(6)(13)</sup>, 応力ヒステリシス ( $\sigma_{hys} = \sigma_{Ms} - \sigma_{Af}$ ) が低温で著しく拡大する問題があり実用化には至っていない. C-IC 転移は, M 変態に影響を与える相転移であることから, 低温における形状記憶特性などの材料物性に影響を与えると推測できる. このように Ni 組成を高めた Ti-Ni 基合金を用いた物性調査を行うことで, C-IC 転移の本質理解が進展すれば, Ti-Ni 基合金の低温利用など新たな応用の可能性が期待できる.

本研究は筆者が大学院在籍時にスタートしたテーマである. 東北大学大学院マテリアル・開発系の貝沼亮介教授, 大森俊洋准教授, 許 焜助教には全体にわたり研究の指導を頂きました. ここに謝意を表します.

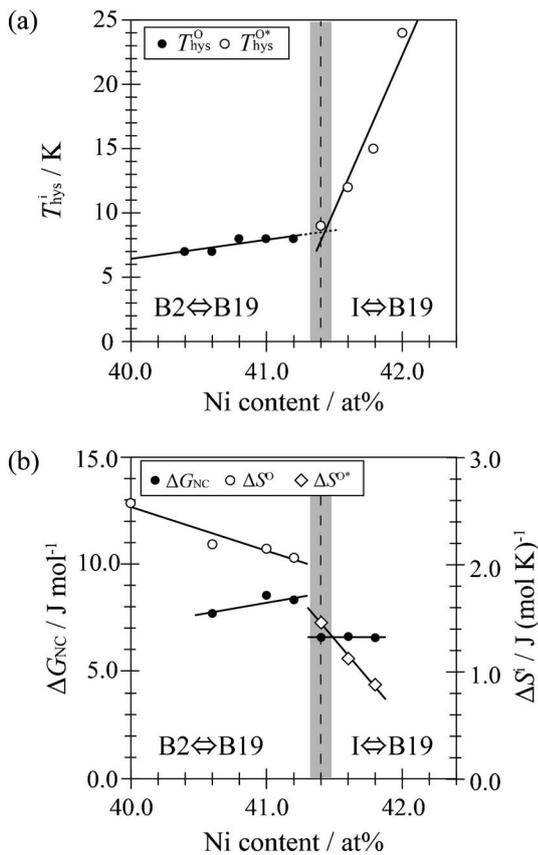


図 6 (a) 変態ヒステリシス  $T_{hys}$ , (b)  $\Delta G_{NC}$  および  $\Delta S$  の Ni 組成依存性.

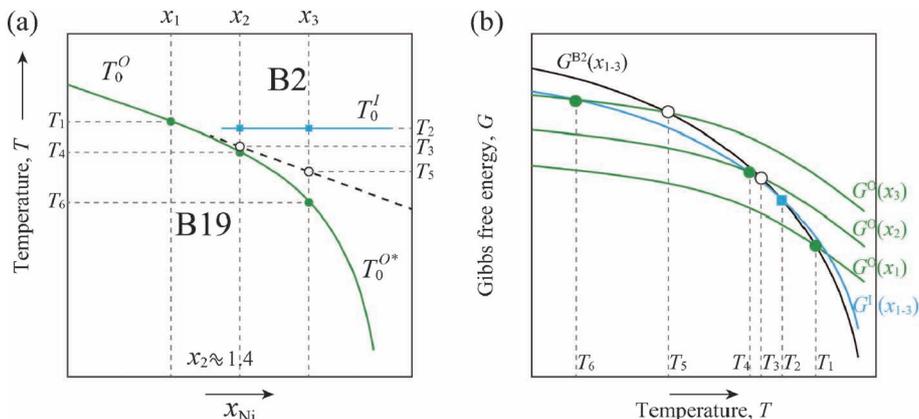


図 7 (a) 実験結果(図 4)に基づく  $T_0^i-x$  相図, (b) 各相の  $G^i-T$  曲線の模式図. (オンラインカラー)



# フッ素添加中性塩水溶液を用いたステンレス鋼の 電解式表面改質法

山本正登<sup>1)</sup> 王 榮 光<sup>1)</sup>\* 土取 功<sup>1)</sup>\*\*  
佐藤直子<sup>1)</sup>\*\*\* 中井 誠<sup>2)</sup>

## 1. 緒 言

ステンレス鋼の優れた耐食性は、クロムリッチな基材に加え、製造工程の最終段階における連続焼鈍・酸洗時や機械加工後に形成された厚さ数 nm の酸化(水酸化)クロムを主体とする不動態皮膜によるものである。勿論、不動態皮膜は化学的に安定で欠陥が少なく、また緻密なほど腐食が起りにくい。一方、塩化物イオンはこの不動態皮膜を破壊する作用が強く、微量でもステンレス鋼表面の欠陥部から溶解を誘起し、孔食を発生させる。特にステンレス鋼の溶接加工後には、酸化スケールとその周辺に熱影響部(溶接焼け)が形成され、耐食性が著しく低下する。これらの熱影響部を除去するため、従来から毒劇物の硝フッ酸による酸洗が長年に亘り採用されて来たが、再不動態化の観点からすれば不十分であり、環境面からも適切な処理とは言い難い。これを改善するため、基材により多くの Cr、Ni や Mo などの元素を添加し、炭素含有量を減らした鋼種も開発されているが、高価になることは避けられず、より安価でより高い耐食性を付与出来る表面改質法の開発が求められている。

ステンレス鋼の不動態皮膜に関して化学安定性の向上や欠陥数の減少に伴う緻密化を図るため、多くの表面改質法が試みられてきた。柴田ら<sup>(1)-(4)</sup>は、硝フッ酸溶液中で SUS304 鋼に電解処理を施し、その耐孔食性を大幅に向上させた。こ

れは、フッ素が鉄イオンを溶出させ皮膜中のクロム量を濃縮させたためと解釈している。また、石見ら<sup>(5)</sup>は、数種類の有機酸に過酸化水を加えた溶液で SUS304 鋼に電解研磨を施し、耐孔食性向上を実現した。また、原ら<sup>(6)-(8)</sup>は、弱酸性 Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> 溶液の中で電解処理によってステンレス鋼表面に露出している MnS を除去することによって SUS316L 鋼の耐食性を改善した。また、王<sup>(9)</sup>は、中性食塩水中で超音波を利用して SUS304 鋼表層の介在物を除去することによって孔食電位の上昇を実現した。

著者(山本ら)は危険な硝フッ酸に代る安心、安全な溶接焼けの除去方法として“中性塩電解焼け取り法”を開発し、30余年に亘り普及に努めてきた<sup>(10)(11)</sup>。図 1 に中性塩電解法による焼け取り作業風景を示す。

さらに、この中性塩電解焼け取り法を進化させる過程で、中性塩電解液に特定な元素を配合し、ステンレス鋼を電解処理すると、その耐食性を大幅に向上できる可能性が見出されてきた。そこで、2014、2015年度に経済産業省の「戦略的基盤技術高度化支援事業」に採択され、耐塩素孔食性が飛躍的に向上する機構の解明、電解液の組成と電解処理条件の検討を加え、“ステンレス鋼の電解式表面改質法”を開発し、低コストで高耐食性を付与できるハンディーな手法として実用中である。本稿では、本技術の概要、ステンレス鋼の耐食性の評価結果および耐食性向上の機構について紹介する。

## 2. 開 発 技 術

本技術では、フッ素化合物を配合した中性塩電解液をベースに、電解条件を工夫することで、ステンレス鋼表面に安定で緻密な不動態皮膜を形成させた。その実施概要を図 2 に示す。具体的には電源器の正極をステンレス鋼に、負極は吸水性の布(モップ)を被覆した電極に接続し、モップに中性の電解液を染み込ませて、処理対象に軽く当てて図 3 に示す交直重畳電圧を印加して数秒間摺動させた。

モップで被覆した電極をステンレス鋼に当てると電気が流れる。最初の正電圧を印加した際には、中性塩の水溶液は電

\* 株式会社ケミカル山本：1)社長 2)部長

\*\* 広島工業大学工学部機械システム工学科：1)教授

\*\*\* 国立研究開発法人産業技術総合研究所 製造技術研究部門：1)研究員

Electrolytic Surface Treatment Method for Stainless Steel by Aqueous Solution of Neutral Salt Containing Fluorine; Masato Yamamoto\*, Rongguang Wang\*\*, Isao Tsuchitori\*\*, Naoko Sato\*\*\* and Makoto Nakai\* (\*Chemical Yamamoto Co. Ltd. \*\*Department of Mechanical Systems Engineering, Faculty of Engineering, Hiroshima Institute of Technology. \*\*\*Advanced Manufacturing Research Institute, National Institute of Advanced Industrial Science and Technology) 2018年8月24日受理[doi:10.2320/materia.58.38]

気分解によりステンレス鋼の表面に酸(H<sup>+</sup>)が生成し、表面の既存皮膜を溶解する。また、水の電気分解により酸素が発生し、地肌が出た表面を直ちに酸化して不動態皮膜を再生する。図3に示すように印加時間(10.6 ms)の長く電圧が高い陽極側(ステンレス鋼)では、溶液中のフッ素イオンが一旦生成した皮膜の酸素原子や水酸基と置換する。鉄やニッケルのフッ素錯イオンは溶解しやすいため溶液に溶け出し、クロムとフッ素は可溶性イオンになりにくくクロムフッ化物として皮膜に残り<sup>(12)</sup>、クロムの比率が増大する。一方、印加時間(3.7 ms)が短く電圧も小さい陰極側(ステンレス鋼)では、皮膜の一部の還元があるものの、皮膜の深い所のフッ素イオンの表面への引き戻しは少なく、皮膜中のフッ素の大部分は残留する。また、交直重畳電圧を一定時間(サイクル)に印加することで、皮膜中のフッ素の侵入が深くなり、クロムの濃縮が顕著になる。また、フッ素イオンは皮膜中の鉄やニッケルの溶解を促進する作用があり<sup>(13)</sup>、クロムの濃縮をもたら



図1 電解法による焼け取り作業状況。

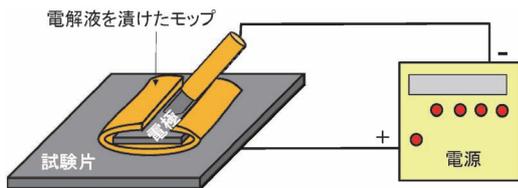


図2 電解処理実施の模式図。

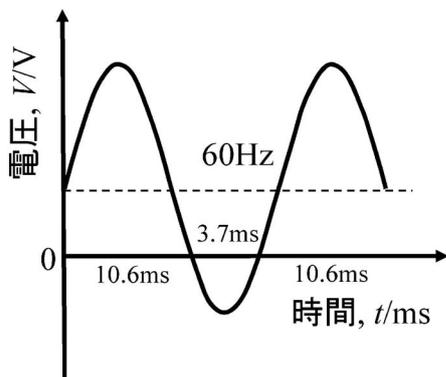


図3 交直重畳電圧の波形。

す。勿論、この方法は、ワイヤブラシで不動態皮膜を削り取った箇所などや焼けのある所の不動態化処理にも適用でき、新たな補修方法の提供に繋がる。本技術では、交流電圧で皮膜の形成が困難であり、直流電圧で表面が溶解され過ぎて白ボケが生じ易く仕上がりに難があるため、交流電圧や直流電圧を採用しなかった。

以下では、オーステナイト系ステンレス鋼 SUS304 の表面研磨をしていない2B試験片(以下2B材と略す)および#2000研磨試験片(以下2000材と略す)を例とし、電解処理前後の表面・断面観察、成分分析、耐食性評価およびメカニズム等について説明する。

### 3. 不動態皮膜の観察・分析

SEMによる表面観察では、電解処理後の2B材表面(図4(a))の溝が侵食によってさらに鮮明になり、また研磨試験片表面に局所溶解が見られた。このような局所溶解は、皮膜の欠陥部(介在物, 加工誘起マルテンサイト等)が除去され、電解処理によって再不動態化が生じ、均一かつ緻密な皮膜の形成に繋がる。また、FE-TEMによる断面観察では、両材とも処理前後で皮膜厚さに大差がなく、3~4 nm程度と見られた。一方、2B材表面に現れた溝部(図4(a))の断面を観察したところ、図4(b), (c)に示すように処理前の膜厚にばらつ

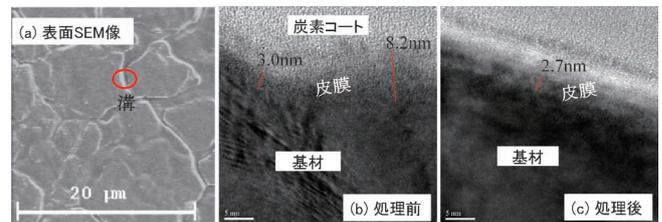


図4 SUS304鋼2B材の電解処理後の表面形態(a: SEM像)および電解処理前後の溝近傍での不動態皮膜の断面形態(b, c: TEM像)。

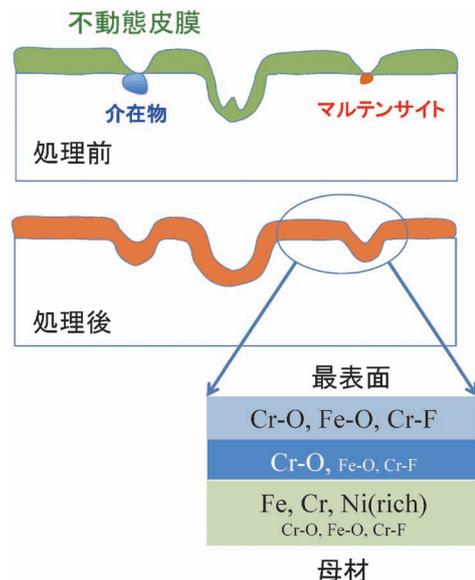


図5 電解処理後の不動態皮膜の成分分布の模式図。

きが大きいことに比べ、電解処理によってそれは均一化された。また、電子線エネルギー損失分光法(EELS)分析では、皮膜から酸素が検出されるとともに皮膜中のクロム/鉄比率が母材のそれより明らかに高いことが確認された。XPSによる深さ方向分析によると、皮膜中のクロムとフッ素が濃化し、一部クロムフッ化物になっていると考えられる。図5に不動態皮膜の成分構造概念を示す。いずれの試料も最表面から順次に素地の金属成分以外に鉄・クロム主体の酸化物、クロム主体の酸化物が特徴である。また、TOF-SIMS分析では、皮膜の中に侵入したフッ素は、主にフッ素イオン(F<sup>-</sup>)となるが、僅かなC<sub>2</sub>F<sup>2-</sup>も認められる。フッ素イオンは、主にクロムと結合したものと推測される。

#### 4. 耐食性評価

図6には、JISG 0578に準じ、酸性FeCl<sub>3</sub>水溶液中に24時間浸漬した各種試験片の腐食速度を示す。2B材の場合には、電解処理後の腐食速度は未電解処理に比べると約1/3まで減少した。一方、2000材の場合では、電解処理材の腐食速度は未処理材の1/2程度まで減少した。また、未処理材の場合では、2B材の腐食速度は2000材より低い。表面観察では、電解処理後の試験片表面に現れた腐食痕跡は未処理のそれより少ない。

図7には、JISG 0577に準じ、1.0M NaCl水溶液中で測定

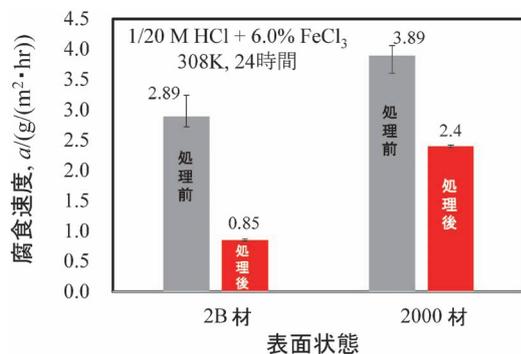


図6 電解処理前後のSUS304鋼の腐食速度。

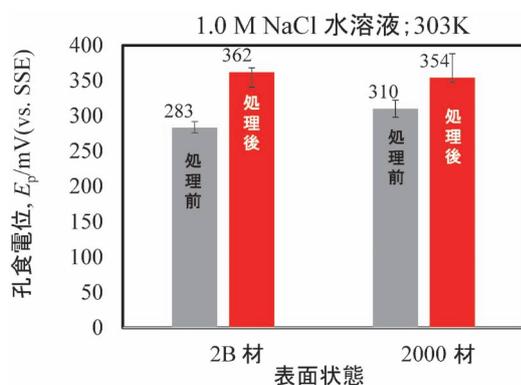


図7 電解処理前後のSUS304鋼の孔食電位。

された分極曲線から得られた孔食電位を示す。2B材の場合では、未処理表面に比べて電解処理によって未処理材の孔食電位は79 mV上昇の362 mVとなった。一方、2000材の場合では、電解処理の孔食電位は未処理材の電位より44 mV高い。また、未処理材の場合では、2B材の孔食電位は2000材より低い。これらの結果より、2B材や2000材ともに、電解処理による耐食性向上効果が認められた。

#### 5. 電解処理による耐食性向上の機構

フッ素化合物添加の中性塩水溶液に電解処理を施したステンレス鋼の耐孔食性の向上は、電解処理による表面の不純物や介在物の除去、既存の不動態皮膜が溶解除去された後に緻密で均一な不動態皮膜の再生、再生不動態皮膜中のクロムの濃化、安定なクロムフッ化物の生成、更の不動態皮膜中のフッ素の存在が、塩化物イオンのステンレス鋼表面へのアタックをブロックすることなどによるものと考えられる。2000材と2B材で電解処理効果の程度に違いが見られるが、ステンレス表面の粗さや研磨材の残存等の影響が考えられる。

#### 6. 実用状況および特許

フッ素化合物配合の中性塩電解液を用いたステンレス鋼の電解式表面改質法は、食品機械、化学反応槽、水門、エスカレーターのメンテナンス(さび除去、耐食性増強など)等に適用され、適用事例は増加の一途をたどっている。また製品製造時の高品質仕上げ(使用材料以上の耐食性付与)を目的とした適用にも注目が集まっており、今後ステンレス鋼が採用される幅広い分野へ適用が拡大すると考えられる。本技術に関連した特許も取得済み<sup>(11)(14)(15)</sup>である。

#### 文 献

- (1) 柴田俊夫, 山崎 修, 松浦 修, 藤本慎司: 表面技術, **50** (1999), 453-59.
- (2) 柴田俊夫, 山崎 修, 藤本慎司: Zairyo-to-Kankyo, **48** (1999), 41-46.
- (3) 柴田俊夫, 山崎 修, 藤本慎司: Zairyo-to-Kankyo, **48** (1999), 155-161.
- (4) 山崎 修, 柴田俊夫: Zairyo-to-Kankyo, **48**(1999), 569-574.
- (5) 石見清隆, 井田義明, 津高文幸, 杉本克久: 表面技術, **67** (2016), 150-158.
- (6) N. Hara, K. Hirabayashi, Y. Sugawara and I. Muto: Int. J. Corros., **2012**(2012), ID 482730.
- (7) 原 信義: Zairyo-to-Kankyo, **63**(2014), 132-137.
- (8) 原 信義: まてりあ, **55**(2016), 207-214.
- (9) R. Wang: Corrosion Engineering, Science and Technology, **51** (2016), 201-210.
- (10) 山本正登, 林 慶治: 特許第3484525号.
- (11) 山本正登: 特許第4218000号, 特許第4678612号.
- (12) 春名 匠, 柴田俊夫, 沖 孝広: Zairyo-to-Kankyo, **43** (1994), 331-335.
- (13) 山崎 修: Zairyo-to-Kankyo, **43**(1994), 265-271.
- (14) 山本正登, 中井 誠: 特許第6167411号.
- (15) 山本正登, 後藤卓弘, 常吉紀久士: 特許第5747268号.

# 電気自動車用高耐摩耗性銀めっき膜の開発

成枝 宏人\* 宮澤 寛\*\* 菅原 章\*\*\*

## 1. 開発背景

世界的な排ガス規制の強化により、電気自動車に代表される環境対応車両の普及が加速している。電気自動車は一般的に専用のプラグを介して充電され、プラグに使用される端子には、車両ライフから1万回以上の挿抜に耐える耐久性が求められている<sup>(1)</sup>。

従来、これらの端子には、電気伝導性と接触信頼性に優れた銀を主体とする合金めっきが適用され、特に1 mass%程度のアニチモンを含有する高硬度の銀合金めっきを数十 $\mu\text{m}$ 厚付けして耐摩耗性を確保していた。

しかしながら、銀-アニチモン合金めっき膜は、高硬度ではあるものの、銀特有の凝着現象により摩耗が生じてしまうこと、高温環境下では銀合金めっき膜中のアニチモンの酸化が生じ接触抵抗が上昇してしまうこと、また、経年および高温化に曝されることで再結晶化が進み初期の高硬度を維持できず摩耗が促進されること、といった問題がある。また、素地露出までの時間を稼ぐために厚付けしており、生産性が低く高コストであるという問題も抱えている。

今後さらに電気自動車が普及していくのに際し、充電プラグ等の端子のめっきは、高耐摩耗性、接触信頼性に優れ、かつ低コスト化が求められており、薄膜化しても高耐摩耗性と接触信頼性に優れためっき膜を開発できればその要求に応えることができる。

電気接点に使用されるめっき金属として、金、ニッケル、錫等も挙げられるが、接触信頼性および金属価格の観点か

ら、いずれも銀には及ばない。銀の耐摩耗性を向上させる手法として、銀-アニチモンのような合金化による高硬度化する方法の他に、グラファイトのような自己潤滑性を持つ物質を複合化させる方法が挙げられる。電気めっきでグラファイトを共析させる従来技術として、特殊な界面活性剤や表面被覆処理を使用するもの<sup>(2)</sup>などがあるが、いずれもコストが著しく高く、市場の要求に応えられない。

著者らは、工業化に適したグラファイト粒子の前処理および銀めっき膜の成膜工程条件と結晶状態との関係について研究を進めることで、5 $\mu\text{m}$ という比較的薄膜の状態でも銀-アニチモン合金めっき膜50 $\mu\text{m}$ 同等以上の耐摩耗性を有する銀-グラファイト複合膜を開発した。また、この開発した複合膜は、高温に曝された場合でも接触抵抗値の増加や酸化変色が抑制され、かつ硬度変化も小さいことから初期性能を長期間に渡り安定して維持することが可能になった。

## 2. 銀-グラファイト複合膜の開発

グラファイト粒子は、厚さ数 $\mu\text{m}$ の銀めっき膜中で潤滑性を発現させるために、平均粒径5 $\mu\text{m}$ 、厚さ0.1~0.5 $\mu\text{m}$ の鱗片状グラファイトを選定した(図1)。

疎水性であるグラファイト粒子を銀めっき液中にそのまま

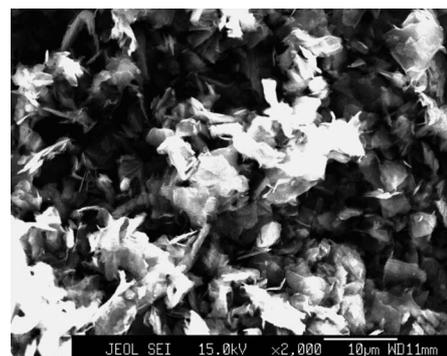


図1 グラファイト粒子の外観。

\* DOWA メタルテック株式会社 金属加工事業部 磐田技術センター；センター長

\*\* DOWA ハイテック株式会社 めっき加工部；製造部長

\*\*\* DOWA メタルテック株式会社；代表取締役社長

Development of the High Wear Resistance Silver Composite Coating for EV/PHV Terminals; Hiroto Narieda\*, Hiroshi Miyazawa\*\* and Akira Sugawara\*\*\*(\*,\*\*\*DOWA METALTECH Co., Ltd. \*\*DOWA HIGHTECH Co., Ltd.)

2018年10月16日受理[doi:10.2320/materia.58.41]

添加し、電気めっきしても、グラファイト粒子は銀めっき膜中に複合されない。グラファイト粒子を銀めっき膜中に複合させるためには、粒子表面に付着している分子量44~240の脂肪族炭化水素や、分子量78~134のベンゼン系・ナフタレン系芳香族炭化水素といった疎水性有機物を除去し、粒子表面を親水性にすることで、銀めっき液中での分散性を向上させる必要がある。

鋭意研究の結果、強酸化剤であるペルオキシ二硫酸カリウム( $K_2S_2O_8$ )を用いて湿式で酸化処理することにより、グラファイト粒子表面の疎水性有機物を除去し(表1)、銀めっき膜中への複合化を実現した<sup>(3)</sup>。

本処理方法は湿式反応を利用しているため、一度に大量に処理することができ、工業的に適している。電解脱脂と酸洗を行った銅板に銀ストライクめっきを行い、その後、酸化処理したグラファイト粒子を懸濁させたアルカリシアン銀めっき液で電気めっきすることにより、銀-グラファイト複合膜が得られた。図2に銀-グラファイト複合膜の断面と表面の観察結果を示す。

耐摩耗性を向上するにはグラファイトの複合化量を増加することが重要である。複合化量を増加するために、グラファ

表1 グラファイト粒子表面の酸化処理前後の有機成分分析結果(GC-MS)。

名 称	分子 量	検出強度				
		処理前	処理後			
脂肪族 炭化水素	アルケン	ブテン	56	3,144,919	4,607,692	
		3-メチル-3- ヘプテン	112	3,784,837	—	
		3-エチル-3- ヘキセン	112	8,545,655	—	
		3-メチル-2- ヘプテン	112	6,635,173	—	
アルカン	ノナン	128	7,517,631	—		
	n-デカン	142	33,201,250	2,247,064		
	n-ウンデカン	156	34,487,440	1,960,814		
	n-ドデカン	170	25,659,890	839,178		
	n-トリデカン	184	21,593,880	—		
	n-テトラデカン	198	20,702,350	—		
	n-ペンタデカン	212	7,383,416	—		
	n-ヘキサデカン	226	7,460,682	—		
	2-メチルデカン	240	6,486,639	—		
	芳香族 炭化水素	ベンゼン系	ベンゼン	78	6,774,720	2,834,457
			トルエン	92	15,352,830	4,401,590
		エチルベンゼン	106	4,157,454	—	
		p-キシレン	106	7,788,405	1,021,066	
		m-キシレン	106	5,125,236	—	
		o-キシレン	106	7,625,775	—	
		トリメチルベン ゼン	120	17,572,940	—	
		メチルエチルベン ゼン	120	6,787,947	—	
		スチレン	104	7,625,775	—	
ナフタレン系		ナフタレン	128	6,481,065	—	
	C8H16	112	4,510,563	—		
	C10H14の芳香 族炭化水素	134	7,537,705	—		
	その他	ケトン	アセトアルデヒド	44	3,144,919	4,607,692
	アセトン	58	6,291,980	7,838,290		
	二酸化硫黄	64	3,924,202	—		

イトの懸濁量、電流密度およびめっき液成分、具体的にはシアン銀カリウム( $KAg(CN)_2$ )、シアン化カリウム(KCN)、セレンシアン酸カリウム( $KSeCN$ )の濃度について検討を行った。図3に電流密度、グラファイト懸濁量と複合化量の関係を示す。

電流密度が高くなるにつれ複合化量が低下したのは、グラファイト粒子と陰極間の親和力が弱いためと考えられる<sup>(4)</sup>。懸濁量が80 g/Lにてピークを迎えたことについては、増量により共析の頻度が増えるものの、液の粘度も増加し、粒子の移動が抑制されたためと考えられる。また、電流密度と液組成との関係については、電流密度、Ag/KCN濃度比およびSe濃度により、複合化量に差が見られた。

これら試料のXRD結果からAgの配向強度比を求めたところ、グラファイトの複合化量は、Ag{220}配向強度比と相関がみられた(図4)。グラファイト粒子が銀めっき膜に複合化する過程で、まずグラファイト粒子のめっき表面への吸着

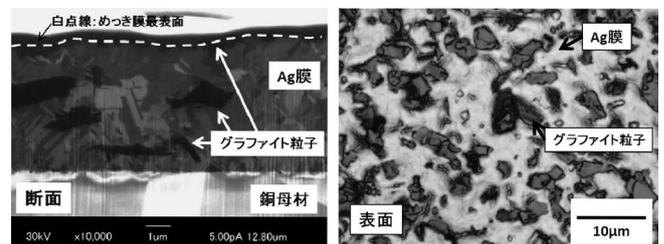


図2 銀-グラファイト複合膜の断面および表面外観。

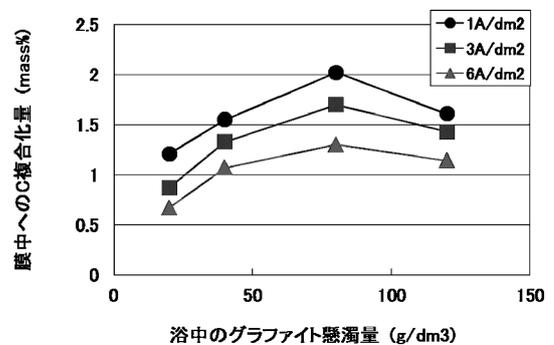


図3 グラファイト懸濁量とC複合化量の関係。

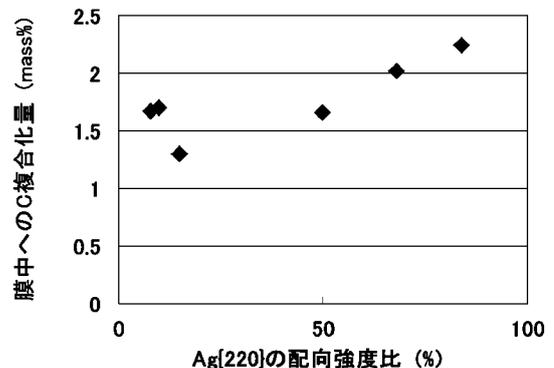


図4 電流密度と浴組成が異なるめっきのAg{220}配向強度比とC複合化量の関係。

が起き、次に銀めっき膜結晶による取囲みが起こると考えられる<sup>(5)</sup>。鱗片状であるグラファイト粒子に対して、複合化に最適な銀めっき膜結晶の成長方向が存在することが示唆される。

### 3. 銀-グラファイト複合膜の特長

#### (1) 耐摩耗性

開発品である銀-グラファイト複合膜めっき5 $\mu\text{m}$ と市販の銀-アンチモン硬質めっき50 $\mu\text{m}$ で耐摩耗試験(摺動試験)を行った。同じめっき材の組合せでインデント(R=1mm)とプレートを用意し、荷重2N、摺動距離片道10mmを摺動速度3mm/秒で2万回往復させた。

図5に試験後の外観を示す。銀-アンチモン品は2千回程度で素材露出が始まり、2万回後にはインデントが磨滅し摺動幅全幅で素材が露出しているのに対し、開発品はめっき厚が1/10と薄い状態であるにも関わらず、素材の露出は観察されなかった。開発品の摺動部位の試験後のめっき厚は3~4 $\mu\text{m}$ であり、1~2 $\mu\text{m}$ 程度しか削れていない。銀-アンチモン品の試験時の摩擦係数が1.5と高いのに対し、開発品の摩擦係数は0.2程度であり、グラファイトが銀特有の凝着およびアブレイブ摩耗を抑制したと考えられる。

#### (2) 耐熱性

180 $^{\circ}\text{C}$ 、96時間、大気中で保持した後の表面の接触抵抗値を測定したところ、開発品は1m $\Omega$ 以下、銀-アンチモン品は10m $\Omega$ 以上と開発品が優れていた。図6にEPMAにより元素MAP分析した結果を示す。銀-アンチモン品は、アンチモンと酸素の検出強度が増加し、酸化アンチモンの生成により接触抵抗値が増加したと考えられる。外観も黄色に変色した。一方、開発品は、初期状態からの変化が小さく、外観もほとんど変化していない。

また、銀-アンチモン品の加熱後のビッカース硬さはHV100まで軟化し、加熱試験後の耐摩耗性も大きく低下した。開発品も初期に比べて軟化した(HV92 $\rightarrow$ HV75)が、グラファイトの効果により摺動試験2万回をクリアし、初期と変わらず優れた耐摩耗性を示した。

### 4. 実績, 将来性, 発展性

銀-グラファイト複合めっき膜に関する特許は、世界各国で既に12件権利化されており<sup>(6)</sup>、研究成果が特許の面でも広く認められている。

また、銀-グラファイト複合めっき膜を施した充電プラグ端子は、優れた高耐摩耗性と高信頼性が確認されており、採用に向けた最終評価段階まで進んでいる。

さらに、本技術を用いた銀めっき膜は、高温環境下での硬度低下や酸化による接触抵抗値の変化が小さいため、高温環境に曝され、かつ長期に渡り耐摩耗性を求められる車載用高信頼性コネクタ接点などで、金めっき膜の代替となりうる可能性もあり、大幅なコスト低減が期待できる。

以上のように、今回の開発品およびグラファイト複合化技

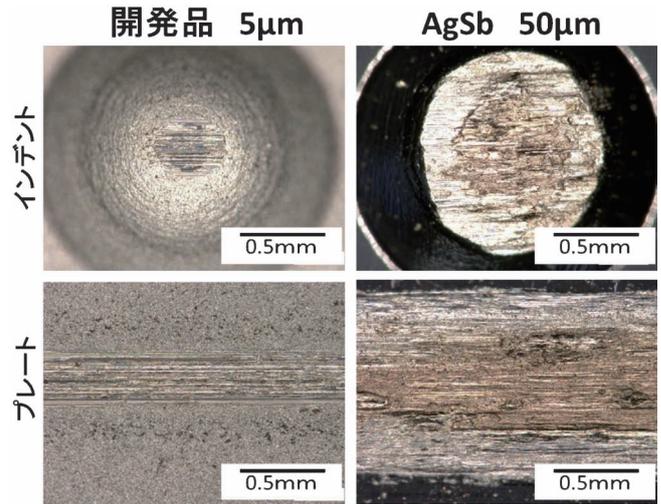


図5 摺動試験2万回後の外観。

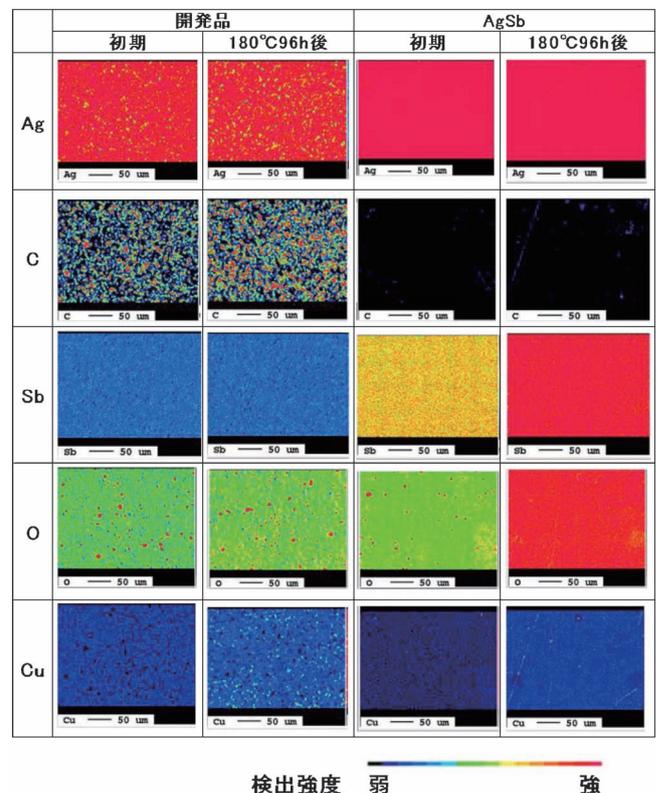


図6 耐熱試験前後のEPMA元素MAP分析結果。

術は多くの可能性を秘め、その価値は極めて高いといえる。

### 文 献

- (1) 清水 徹, 高田明典, 近田一元: SEI テクニカルレビュー, **185**(2014), 38-41.
- (2) 右田泰治, 齋藤明夫: 北九州工業試験場研究報告, **1989**(1990), 122-126.
- (3) 宮澤 寛, 米澤 歴, 井上明人, 菅原 章: 銅と銅合金, **51**(2012), 212-216.
- (4) 林 忠夫, 古川直治: 表面, **18**(1980), 152-163.
- (5) 宮澤 寛: 博士学位論文, 群馬大学, (2016).
- (6) 例えば特許第4669967号.

# 極低温超弾性の発現とその弾性熱量効果

新津 甲大<sup>\*,\*\*</sup> 許 勝<sup>\*</sup> 木村 雄太<sup>\*,\*\*\*</sup>  
 大森 俊洋<sup>1)</sup> 貝 沼亮介<sup>2)</sup>

## 1. はじめに

熱弾性型マルテンサイト変態に伴い形状記憶効果および超弾性(擬弾性)を示す形状記憶合金は、従来その特異な機械的特性を活かした構造部材・機能性部材としての応用が図られてきた。しかし、いずれも室温以上での応用を見据えた研究がほとんどであり、低温での諸物性については十分に研究されてこなかった。実用材である TiNi 基合金では、低温でのマルテンサイト変態の発現がそもそも困難である<sup>(1)</sup>ことから、その低温応用の実現には合金の選定・設計段階から抜本的な検討が必要とされる。また一方で、近年マルテンサイト変態に伴う大きな潜熱を利用した熱量効果の観点で、応用の可能性が大きな注目を集めている<sup>(2)</sup>。形状記憶合金の熱量効果は、主に磁場誘起変態すなわちメタ磁性転移に伴う磁気熱量効果(Magnetocaloric effect)と応力誘起変態すなわち超弾性に伴う弾性熱量効果(Elastocaloric effect)が研究されている。TiNi 基合金は、室温における変態潜熱(変態エントロピー変化  $\Delta S$ )は大きいものの、常磁性であることや(B19')相への変態の場合)変態ヒステリシスが大きいことなどから、熱量効果の観点で実用的優位性は必ずしも盤石ではない。

筆者らは、最近の研究の中で、CuAlMn 合金が低温環境下、特に 4.2 K という極低温域でも優れた超弾性を有すること、またそれに伴い比較的低温域まで弾性熱量効果が得られることを明らかにした<sup>(3)</sup>。本稿では TiNi 基合金や NiCoMnIn メタ磁性合金と比較しつつ、CuAlMn 合金が示す低温環境下での超弾性挙動と、それに伴う弾性熱量効果について紹介する。

## 2. 極低温超弾性

Cu-17Al-15Mn(at%) 合金単結晶の超弾性挙動の温度依存性を図 1 に示す<sup>(3)</sup>。温度の低下に伴い平衡応力  $\sigma_0$  ( $\approx (\sigma_M +$

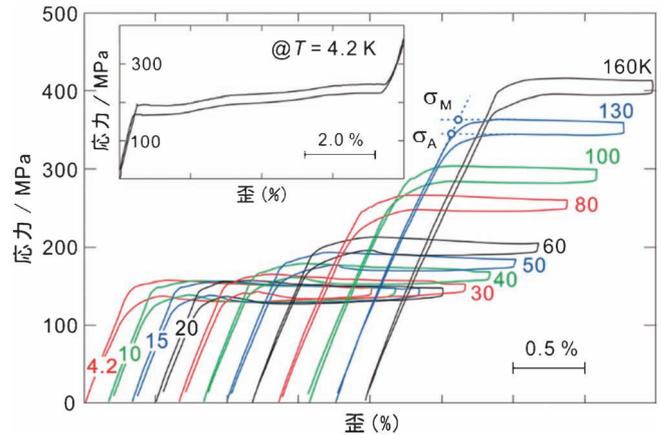


図 1 CuAlMn 合金単結晶の応力-歪曲線の温度依存性。 $\sigma_M$ ,  $\sigma_A$  はそれぞれ応力誘起正変態開始応力および逆変態終了応力<sup>(3)</sup>。(オンラインカラー)

$\sigma_A$ )/2)は低くなる一方、応力ヒステリシス  $\sigma_{hys}$  ( $\equiv \sigma_M - \sigma_A$ ) は 4.2 K までほぼ一定であることが分かる。図 1 の挿図は、同合金の 4.2 K におけるマルテンサイト変態完了までの応力-歪曲線であり、現象論解析で見積もられる値とはほぼ同等な 7.1% もの超弾性歪が得られた。ステンレス鋼をはじめとする多くの金属材料が極低温環境では発熱による塑性不安定のため間欠的な変形挙動(セレーション)を示すのに対し、本合金は超弾性による「しなやかさ」を失っておらず、極低温環境での変形に対し特筆すべき優位性を有することが分かる。

母相とマルテンサイト相が平衡する応力状態におけるエネルギー平衡の関係から、以下の Clausius-Clapeyron の関係式<sup>(4)</sup>が導かれる。

$$\partial\sigma_0/\partial T = -\Delta S/\varepsilon V_m$$

ここで  $\Delta S$  はマルテンサイト変態に伴うエントロピー変化、 $\varepsilon$  は変態歪、 $V_m$  はモル体積である。この関係式より、 $\sigma_0$  の温度依存性(図 1)から  $\Delta S$  を導出することができる。 $\sigma_{hys}$  および  $\Delta S$  の温度依存性をそれぞれ図 2 (a), (b) に示す<sup>(3)</sup>。な

\* 東北大学大学院工学研究科金属フロンティア工学専攻; 1) 准教授 2) 教授

\*\* 現: 京都大学大学院工学研究科材料工学専攻; 助教 (〒606-8501 京都市左京区吉田本町)

\*\*\* 現: 東北大学金属材料研究所; 助教

Cryogenic Superelasticity and Concomitant Elastocaloric Effect; Kodai Niitsu<sup>\*,\*\*</sup>, Sheng Xu<sup>\*</sup>, Yuta Kimura<sup>\*,\*\*\*</sup>, Toshihiro Omori<sup>\*</sup> and Ryosuke Kainuma<sup>\*</sup> (\*Department of Materials Science, Graduate School of Engineering, Tohoku University, Sendai. \*\*Department of Materials Science and Engineering, Kyoto University, Kyoto. \*\*\*Institute for Materials Research, Tohoku University, Sendai)

Keywords: cryogenic, superelasticity, elastocaloric effect, shape memory alloy, Cu-Al-Mn, entropy

2018年10月1日受理[doi:10.2320/materia.58.44]

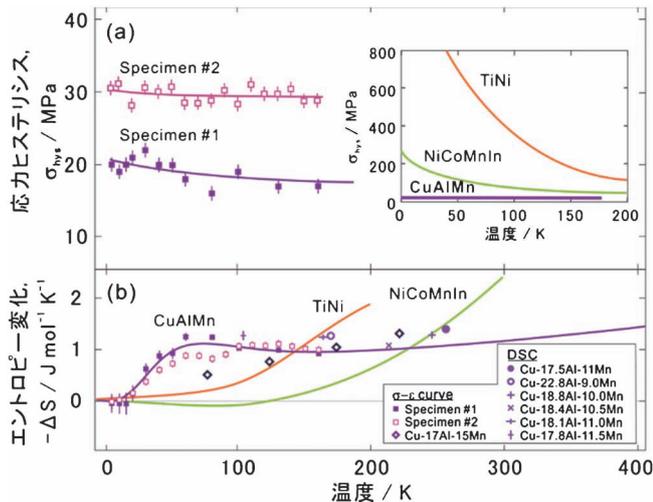


図2 CuAlMn, TiNi, NiCoMnIn 合金における(a)応力ヒステリシス  $\sigma_{\text{hys}}$  および(b)変態エントロピー変化  $\Delta S$  の温度依存性<sup>(3)</sup>. (オンラインカラー)

お、同図中には比較のため TiNi<sup>(5)</sup> および NiCoMnIn<sup>(6)</sup> のデータも記載している。最近の研究から、多くの形状記憶合金において TiNi や NiCoMnIn と同様、低温で  $\sigma_{\text{hys}}$  が大きくなる傾向を示すことが明らかとなっている。これはマルテンサイト相の核生成・成長過程が、転位の運動と同様熱活性化機構を有しているためと考えられる。一方、CuAlMn の  $\sigma_{\text{hys}}$  は温度に依らずほぼ一定であることから、熱活性化機構の寄与が非常に小さい合金であると推測できる。また、 $\Delta S$  の温度依存性については合金系に依らず極低温で 0 に収束する傾向が見取れるが、中でも CuAlMn 合金は 60 K 程度まで室温と同程度の  $\Delta S$  を保持しており、TiNi や NiCoMnIn に比べて低温域で大きな変態潜熱を得ることが可能であることが伺える。CuAlMn 合金の超弾性に伴う熱量効果について、次節でより詳細に紹介する。

### 3. 弾性熱量効果による断熱冷却

熱量効果の大きさを評価する指標としては、変態潜熱  $Q (= T\Delta S)$  とヒステリシス分の仕事  $W$  の 2 つが挙げられる。母相からマルテンサイト相への変態において合金の温度変化  $\Delta T$  は、 $Q$  に対応する冷却効果と  $W$  に対応する発熱効果の和で表され、定圧比熱  $c_p$  を用いて  $\Delta T \approx T\Delta S/c_p + W/c_p$  となる。従って、変態エントロピー変化  $\Delta S$  が負に大きく、ヒステリシスが小さい材料ほど優れた弾性熱量効果を得られることが分かる。図 3(a) に各合金の  $Q$  および  $W$  の温度依存性を示す<sup>(3)</sup>。約 150 K 以下の低温域においては、CuAlMn の  $Q$  が最も負に大きくなり、他の合金に比べ大きな熱量効果が期待できることがわかる。さらに特筆すべきは非常に小さい  $W$  であり、摩擦による温度変化  $W/c_p$  は例えば  $T=10$  K において 28 K と計算され、NiCoMnIn では 635 K、TiNi では 1482 K もの値になることと比べると、CuAlMn では如何に小さい値であるかがよくわかる。また、NiCoMnIn や

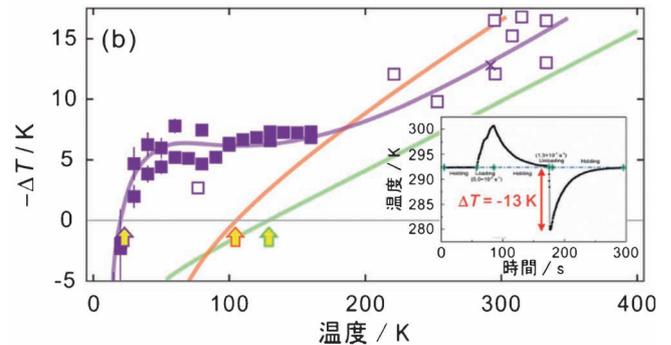
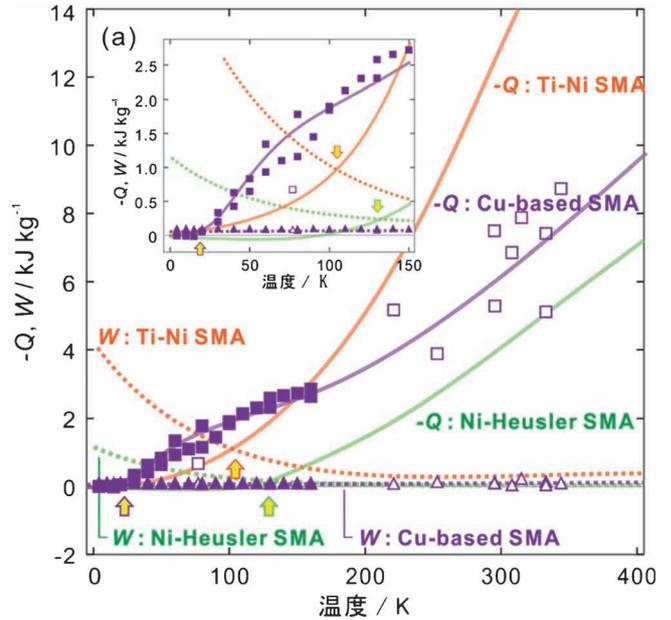


図3 CuAlMn, TiNi, NiCoMnIn 合金における(a) $Q$  および  $W$  の温度依存性、(b)  $\Delta T$  の温度依存性<sup>(3)</sup>。(b) 図中挿図は室温での実測結果<sup>(7)</sup>。(オンラインカラー)

TiNi では、このような晶癖面の移動に伴う大きな局所加熱により超弾性時にセレーションが生じる<sup>(6)(8)</sup>ことが分かっているが、CuAlMn ではそのような不連続な界面移動は 4.2 K でも観測されておらず、超弾性のスムーズな発現が可能な合金であることが分かる。図中矢印の  $-Q$  と  $W$  が交差する点は、冷却効果が得られなくなる ( $\Delta T=0$  となる) 温度を意味するが、TiNi や NiCoMnIn が 100 K ~ 130 K であるのに対し、CuAlMn は約 22 K と低温である。より詳細な  $\Delta T$  の温度依存性を図 3(b) に示す<sup>(3)</sup>。計算によって予測された  $\Delta T$  は、挿図に示した室温付近における実測値  $\Delta T = -13$  K<sup>(7)</sup> とよく一致した。また、比較的大きい  $-Q$  と小さい  $W$  のため、約 50 K 程度まで  $\Delta T = -6$  K 程度の大きな冷却能を保持していることが分かる。なお、 $T \rightarrow 0$  となるに従い  $c_p \rightarrow 0$  と収束することから、最終的には  $\Delta T \rightarrow \infty$  となり冷却効果は得られなくなる。一般に、室温以上では  $W$  による摩擦熱の影響は  $Q$  による冷却効果の約 1 割程度であることからしばしば無視されてきたが、低温では  $c_p$  が小さくなるため摩擦熱  $W/c_p$  の影響は相対的に大きくなる。CuAlMn との比較

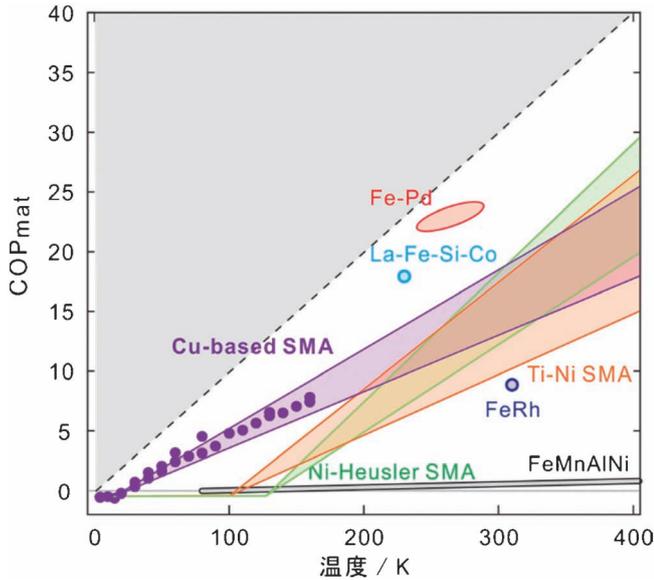


図4 様々な冷却効果を示す材料の  $COP_{mat}$  の温度依存性<sup>(3)</sup>. 図中点線は  $W=0$ , すなわち理論カルノーサイクル COP に相当. (オンラインカラー)

から、従来  $Q$  が大きいことため応用面で有利と考えられてきた TiNi も、この影響のため低温環境ではその優位性を保持できていないことが見て取れる。

種々の冷却効果に対し、材料の冷却能を定量的に評価する性能指数の策定が盛んに試みられている。ここでは、 $W$  の寄与を加味した性能指数として  $COP_{mat}$  (Material-based coefficient of performance)<sup>(9)</sup> を用いて、CuAlMn 合金の弾性熱効果の冷却能力を他の材料の熱効果と比較する。 $COP_{mat}$  は以下の式で表される。

$$COP_{mat} = (-T\Delta S - W) / (-\Delta T_{lift}\Delta S + 2W)$$

ここで  $\Delta T_{lift}$  は系の温度変化の目標値である。このパラメータは、 $W=0$  の理想状態(カルノーサイクル)で使用温度に比例する  $COP_{mat} = T/\Delta T_{lift}$  の関係となり、 $W$  が大きくなるほど  $-0.5$  を最低値とする低い値となる。種々の冷却効果を示す材料について、 $\Delta T_{lift} = 10$  K と設定したときの  $COP_{mat}$  の温度依存性を図4にまとめた<sup>(3)</sup>。大きな磁気熱効果を示す La(Fe,Si)<sub>13</sub> 基化合物<sup>(10)</sup> やヒステリシスの小さい一次相変態を示す FePd 合金<sup>(11)</sup> は、室温近傍で理論カルノーサイクルに近い優れた性能を有することが分かる。本稿で取り上げた

CuAlMn 合金は、室温以上では他の形状記憶合金と同程度の性能であるものの、低温では他を大きく凌駕する性能指標を有しており、熱効果の側面からも低温应用到に長けた材料であることが数値的に明らかとなった。

#### 4. おわりに

本稿では、形状記憶合金の新たな応用として期待される低温環境での超弾性の発現とそれに伴う弾性熱効果について、CuAlMn 合金を例に取り上げた。極低温環境では、フォノンの影響が相対的に小さくなるために基礎学理としての現象の本質が垣間見ることがままあるが、今回も低温環境下での基礎研究の中で CuAlMn 合金の工学応用上の優位性が浮き彫りとなった。極低温環境でのマルテンサイト変態挙動から、熱力学・動力学の両面にわたり、まだまだ基礎学理上面白い現象を見出す余地がある。今後、基礎・応用の両面から低温域での形状記憶合金の研究が活性化されることを期待する。

#### 文 献

- (1) S. Sarkar, X. Ren and K. Otsuka: Phys. Rev. Lett., **95** (2005), 205702.
- (2) L. Manosa, A. Planes and M. Acet: J. Mater. Chem. A, **1** (2013), 4925-4936.
- (3) K. Niitsu, Y. Kimura, T. Omori and R. Kainuma: NPG Asia Mater., **10** (2018), e457.
- (4) P. Wollants, M. De Bonte and J. R. Roos: Z. Metallk., **70** (1979), 113-117.
- (5) K. Niitsu, T. Omori and R. Kainuma: Appl. Phys. Lett., **102** (2013), 231915.
- (6) K. Niitsu, X. Xu, R. Y. Umetsu and R. Kainuma: Appl. Phys. Lett., **103** (2013), 242406.
- (7) S. Xu, H.-Y. Huang, J. Xie, S. Takekawa, X. Xu, T. Omori and R. Kainuma: APL Mater., **4** (2016), 106106.
- (8) K. Niitsu, Y. Kimura and R. Kainuma: J. Mater. Res., **32** (2017), 3822-3830.
- (9) S. Qian, D. Nasuta, A. Rhoads, Y. Wang, Y. Geng, Y. Hwang, R. Radermacher and I. Takeuchi: Int. J. Refrigeration, **62** (2016), 177-192.
- (10) L. Manosa, D. Gozalez-Alonso, A. Planes, M. Barrio, J.-L. Tamarit, I. S. Titov, M. Acet, A. Bhattacharyya and S. Majumdar: Nat. Commun., **2** (2011), 595.
- (11) F. Xiao, T. Fukuda and T. Kakeshita: Appl. Phys. Lett., **102** (2013), 161914.

# 先達からのお便り

## 私の研究履歴

京都大学名教授；足立裕彦

今から15年前京都大学を定年退職した。その後少しの間、研究プロジェクトの研究員や他大学の客員教授を務めたが、本格的な教育・研究活動から離れて久しい。現役当時思っていたことの記憶も薄れてきているので、後輩の皆様にか役に立つことを申し上げることも心許ない。先達からの便りという話にはふさわしくないが、私の研究歴とその当時の状況や思っていたことなどをふりかえってお話しさせていただくことにする。

学生時代は京都大学理学部化学教室で過ごした。所属したのは無機化学研究室で、分子線を用いた気体分子衝突の研究、固体表面の構造解析、固体の質量分析などの実験が研究内容であった。私自身は分子線グループでアルカリ原子と希ガス原子との弾性衝突の断面積の測定をテーマとして研究を始めた。しかし実験を行い勉強しているうちに、この技術を使えば気体反応の素過程を調べることができることに気が付いた。この問題は化学の最も基本的なテーマであり、指導教授と相談して「交差分子線による気体反応の素過程の解明」をその後の研究テーマとした。この研究を行うのは当時では多くの技術的な問題があり、大学院に入ってからこれらを克服するため、分子線に関して、量子論による粒子衝突論、古典論的気体運動論を勉強した。この実験を行うため真空技術、金属工作、ガラス工作などの技巧をそれぞれの技官の方から工作場に入り浸って学んだ。

研究室では毎週雑誌会があり、それぞれ興味深い論文を見つけて発表する機会が廻ってきた。博士課程の先輩からそのために30編の論文を読み、その研究をよく理解してから発表することを勧められた。実際に何編の論文を読んだかよくは覚えていないが、年何回か自分の番が来る度に多くの論文を勉強したことが思い出される。修士課程では交差分子線装置を作製中であつたので、その予備実験をまとめて修士論文にした。博士課程に進学して装置を完成させ、研究を続けるつもりでいたが、指導教授には技術的に大変困難であるということでよく理解してもらえず進学を断念した。それから20年余りたった1986年にD. R. Herschbachが交差分子線による気体反応の素過程の研究でノーベル化学賞を受賞している。

修士課程を修了し就職先をさがしたが、結局大阪大学工学部の助手に採用された。所属は原子力工学科の新しく出来た核燃料工学講座で、研究室のテーマは高速増殖炉の核燃料を開発することであった。当時の日本では多目的利用の高速増殖炉の開発の機運が高まっていた。製鉄に利用できる高温炉

の燃料ということで酸化物に替わる高融点で高伝導の燃料物質を探索するための研究が行われていた。その物質として炭化物、窒化物、硫化物などの侵入型化合物が考えられ、自分自身のテーマとしてはウランやトリウムなどのアクチニドリン化物を取り上げて研究に取り組んだ。

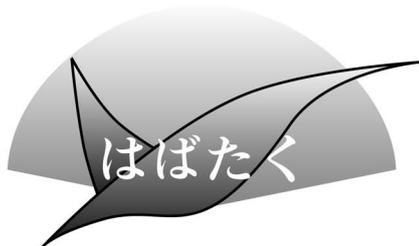
これらの物質の組成や性質など基本的なこともよくわからないが多かったので、まず化合物の生成条件やメカニズムを調べることにした。生成方法としてリンの蒸気とウランやトリウムの粉末との直接反応を考えその生成装置を作り、また反応のメカニズムを調べるためには示差熱法、熱重量法を用いた。さらに生成物の物性として電気抵抗やねじり天秤によるファラデー法で磁化率を測定した。これらの実験は当時まだ市販の装置が十分でなく、ほとんどが自作の手作り装置で行った。これらの実験を行いその考察を行ったが、これら化合物の性質を説明するにはその電子構造を明らかにすることが必要と考えた。そのためエネルギーバンド理論を用いることにした。

ウランのような重元素では相対論効果(非相対論誤差)が大きく相対論による計算が必要になる。その当時は精度よい理論計算の手法もなく、相対論効果を摂動論で取り入れた半経験的なタイト・バインディング法で計算を行った。当時大阪大学に初めて全国共同利用の大型計算機が導入された。大型計算機といっても、機械語で書かれたプログラムやデータを紙テープにパンチして入力するマシーンであった。それでも当時は $10 \times 10$ の行列の対角化の計算が簡単にできるので感激したものである。

遷移金属の侵入型化合物の場合、金属d軌道と非金属のp軌道との相互作用で価電子状態が決まるが、侵入型のウラン化合物の場合はそれに局在的なf軌道が重なり電子構造は大変複雑になることがわかった。そこまでの研究結果をまとめて、「アクチニドリン化物の生成とその電子構造に関する研究」というタイトルで博士論文を書いた。しかしこれらの化合物の性質を正しく理解するには、正確な相対論による理論計算が必要であった。当時米国ノースウェスタン大学材料工学教室のJ. T. Waber教授が初めて相対論による原子構造計算を成功していた。そこで相対論の電子構造理論を学ぶことが必要と思い連絡を取ったところすぐにも来てよいという返事をもらい、博士研究員として米国へ留学した。

相対論の電子構造計算のプログラムを開発しようと思い米国に渡ったのであるが、当時金属表面へ化学吸着した分子の光電子スペクトルが観測され、世界では物性物理の大きなトピックスになっていて、その理論解析が行われようとしていた。Waber教授は相対論プログラムの開発も良いが、固体表面の化学吸着を計算できるプログラム開発も重要であると提案され、そちらを選ぶことにした。その時ノースウェスタン大学の物理学教室のD. E. Ellis博士が、Discrete variational (DV)  $X\alpha$ 法という計算手法を開発し結晶のバンド計算に成功していた。これを固体表面の電子構造計算へ応用しようということで、私の部屋にいた材料教室の博士研究員F. W. Averillとプログラム開発を始めていた。私は彼らと





## 高温酸化物融体に関する研究を通じて

九州大学大学院工学府 物質プロセス工学専攻  
博士課程3年

原田 祐亮

### 1. はじめに

私は2014年3月に九州大学大学院物質プロセス工学専攻の修士課程を修了し、一度社会に出て研究から離れたところで経験を積み、学費を工面し、現在同大学院の博士課程3年生として研究に取り組んでいます。この度、「はばたく」への寄稿という大変貴重な機会を賜りましたので、私のこれまでの研究内容を振り返るとともに、自身の現在の研究活動について紹介させていただきます。

### 2. 研究活動について

私の所属する研究室では、高温(～1600℃)で融けた酸化物(酸化物融体)の粘度や密度などの物性値測定をこれまでに数多く行ってきており、近年この酸化物融体の電気容量やインピーダンスといった電気的な性質の測定も行っています。例えば電気容量測定は、酸化物融体の結晶化の検出などに用いることができます。酸化物融体はイオンが多く存在することから比誘電率が非常に高いのに対し、一方で固体結晶はイオンが結晶格子に囚われているため分極能が小さく比誘電率は低くなります。この誘電率の差を利用して、酸化物融体が結晶化した際に、電気容量の減少として可視化できます。

そのような研究を行っている研究室に所属した私は、修士課程で、「電気容量測定による過冷却酸化物融体の結晶化率の定量化」という研究テーマを頂きました。前述の通り、当時は融体と固体の誘電率の違いによって結晶化を検出できることはわかっていましたが、その量を定量化するには至っていませんでした。実際に酸化物融体の流動挙動、特に非ニュートン性の挙動を支配するのは結晶化率であることが知られていることから、結晶化率を定量化することは酸化物融体の流動挙動の解明にも大きな意義があります。研究目的を達成するために、室温での予備実験、高温での実験を繰り返しました。その結果、電極の幾何学的形状から求めた電気容量モデルと多相流体の誘電率モデルを用いて、測定した電気容量の値から、その場で融体中の結晶化率を定量化することに成功しました<sup>(1)</sup>。それと同時に、図に示すような酸化物融体の電気容量と粘度を同時に測定できる装置を開発しました。この装置を用いることで、結晶化率の上昇を観測しながら、それともなう粘度の変化をその場で観察できるようになりました。したがって、固相が融体の流動挙動に及ぼす影響を評価することが可能となり、複雑な固液共存酸化物融体の流動挙動の解明に大きく近づきました<sup>(2)</sup>(図1)。



図1 粘度・電気容量同時測定装置。

融体と結晶の構造の違いを電気的な測定で検出、定量化できるのならば、融体同士の構造の違いも検出できるのではないかと、という発想から博士課程の研究テーマである「酸化物融体のインピーダンス測定による構造推測」という研究に現在取り組んでいます。これまで電気容量の測定を行ってきましたが、より多くのパラメータに因数分解できるインピーダンスに現在は着目しております。最初は測定自体がうまくいかず、試行錯誤の繰り返しでした。しかしこのような経験も、自身で問題を発見し解決するよい機会であったと感じています。この研究によって、インピーダンス測定と熱力学モデルを組み合わせることで、融体構造の推測が可能であることが示唆されました。また、博士課程に進学後は、修士課程の学生の研究テーマの立案、進捗管理も任されました。自分の研究のみならず、後輩の研究についてテーマを考え、そのストーリーを立てていくことは、非常に難しく大変でありましたが、同時に自分に指導させて下さっている先生方や、指導している後輩に対しての責任感を感じながらも楽しく、良い経験をさせて頂けたと、大変感謝しております。

### 3. 研究活動を振り返って

私は学部4年生から現在まで、当研究室で約6年研究に取り組んできましたが、失敗が続き、辛いことや壁にぶつかることも多くありました。しかしそれ以上に、問題を解決したときや研究成果が出たときの何事にも代えがたい達成感を何度も経験しました。この刺激的で心躍るような研究を、これからも柔軟な思考と高い探究心を持って取り組みたいと考えています。

最後に、豊富な経験と知識で研究のみならず普段の生活についてもアドバイスを頂いております中島邦彦教授、齊藤敬高准教授に深く御礼申し上げます。また、今回この「はばたく」の寄稿という場を設けて頂いた編集委員の方、日々私を支えてくださる両親、研究室の学生に深く感謝致します。これからも、人として、一研究者として常に感謝の気持ちを忘れず、やるべきことに精一杯取り組んで参ります。

### 文 献

- (1) Y. Harada, N. Saito and K. Nakashima: ISIJ Int., **57**(2017), 23-30.
- (2) Y. Harada, H. Yamamura, Y. Ueshima, T. Mizoguchi, N. Saito and K. Nakashima: ISIJ Int., **58**(2018), 1285-1292.  
(2018年10月26日受理)[doi:10.2320/materia.58.49]  
(連絡先: 〒819-0395 福岡市西区元岡744)

# スポットライト

～第16回 World Materials Day Award<sup>†</sup> 受賞～

## これぞ日本の伝統金属加工技術： 木目金&煮色着色！

千葉工業大学 工学部 先端材料工学科 3年；高橋 駿

第16回 World Materials Day Award 最優秀賞を賜り、とても光栄に存じます。このような身に余る賞を頂き、メンバー一同大変嬉しく思います。

私たちは、千葉工業大学工学部機械サイエンス学科先端材料工学コースと、この学科の改組により設立された先端材料工学科の学生で構成された学生グループです。学部1年の材料概論の講義で紹介された日本の伝統的金属工芸技術「木目金」と「煮色着色」に興味を持ち、これらの技術を使ったものづくりを、ぜひ自分たちでも実際にしてみたいと考え、自主製作を始めました。木目金とは、色の異なる金属・合金（銅、銀、銅合金など）を幾重にも重ね合わせて高温で圧接した後、表面切削と鍛造・圧延を繰り返すことで、美しい木目模様を作り出す技術とその作品のことを言います。また煮色着色とは、銅合金の表面を大根おろしで洗浄した後、硫酸銅と緑青を含む着色液で煮込むことで、表面を積極的に酸化させる手法で、合金組成に応じた発色により美的価値が向上すると同時に、それ以降の腐食防止が可能になります。

2018年9月20日に東北大学川内北キャンパスで開催された日本金属学会秋期講演大会では、「これぞ日本の伝統金属加工技術：木目金&煮色着色！」と題して、これまでに私たちが行ってきたキーホルダーや指輪などの自主製作の過程と代表的な作品を展示しながら、その内容を大学祭やオープンキャンパスなどで広く発信してきたことについて紹介しました。

木目金の作製方法や煮色着色の処理方法については、何一つノウハウがない状態でしたので、インターネットや書籍で情報を集め、試行錯誤しながら手探りで始めたため、最初は全く思うようにできませんでした。例えば、木目金の元となる材料の組み合わせによって、圧接温度や時間が異なるため、接合自体が全くできないことも多くありました。また十分に圧接しようと加熱温度を高くしたり、加熱時間を長くし



図1 木目金と煮色着色で作った指輪(左)と千葉工大キャラクターのチバニー(右)。(オンラインカラー)

たりした際には、組み合わせた材料自体の融点や液相線温度には気をつけていたものの、それらの接触面では元素が拡散し、共晶の存在によって熔融温度が低下することには気づいていなかったため、電気炉の中で材料を融体させてしまう失敗も経験しました。まさに、身をもって状態図についての理解を深め、その重要性に気づいた瞬間でした。さらに、材料の表面状態によって拡散接合がうまくいかないことに気づき、表面を研磨したり、フラックスを使用したりするなどの工夫もしました。これらも、講義だけではピンとこなかったものです。このような失敗や工夫をくり返すことで、比較的綺麗な木目金が作れるようになったので、最近では指輪やキーホルダー作りにも挑戦し、さらにそれを煮色着色して、表面を綺麗に発色させることもできるようになりました。

このような経験から、私たちは「ものづくりの楽しさ」や「金属材料の魅力」、現在の材料製造にも受け継がれる「日本の技術の素晴らしさ」を知りました。また、作品が完成したときの「達成感」、仲間との共同作業で得た「ひらめき」や「連帯感」はかけがえの無いものとなりました。これまでの活動によって、このような思いを一人でも多くの方々に子供達や中高生達にお伝えしていきたいと考えています。

最後になりますが、私たちの活動について日頃からアドバイスをくださり、今回の応募を助めてくださった小澤俊平准教授に深く感謝いたします。また、加工装置や作業スペースを貸してくださった先端材料工学科の先生方、工作センターの皆様、木目金と煮色着色についてアドバイスをくださった相原健作先生(東京藝術大学)、圧接治具について教えてくださった大橋修先生(WELLBOND)に感謝致します。

(2018年11月19日受理)[doi:10.2320/materia.58.50]

(連絡先：〒275-0016 習志野市津田沼 2-17-1)

<sup>†</sup> World Materials Day Award ; 材料系国際学協会連携組織である IOMMMS では、材料系分野のプレゼンス向上のため「材料に関する知識とその重要性を社会や若者に啓発する活動」に貢献した学生を顕彰している。

# 本 会 記 事

会 告	2019年春期(第164回)講演大会ご案内・参加申込み	51
	2019年春期講演大会併催企業説明会への学生参加者の募集	53
	第7回ランチョンセミナー開催のお知らせ	53
	ランチョンミーティング・託児室設置の予告	53
	2019年春期講演大会機器・書籍・カタログ展示会出展募集および講演大会プログラム・概要集広告募集	54
	2019年秋期講演大会公募・企画シンポジウムテーマ募集	54
	学術貢献賞(第17回)候補者推薦依頼	55
	功労賞(第17回)候補者推薦依頼	55
	奨励賞(第29回)候補者推薦依頼	55
	村上奨励賞(第16回)候補者推薦依頼	55
	第67回論文賞候補論文推薦(自薦)のお願い	56
	第9回まてりあ賞推薦(自薦)のお願い	56
	金属学会セミナー	57, 58
	電子ジャーナル機関購読のご案内	60
支部行事	次号予告	58 61
掲示板	行事カレンダー	59 62
会誌・欧文誌1号目次	新入会員	60 64

事務局 渉外・国際関係: secgnl@jim.or.jp  
 会員サービス全般: account@jim.or.jp  
 会費・各種支払: member@jim.or.jp  
 刊行物申込み: ordering@jim.or.jp  
 セミナー・シンポジウム参加申込み: meeting@jim.or.jp  
 講演大会: annualm@jim.or.jp  
 総務・各種賞: gaffair@jim.or.jp  
 学術情報サービス全般: secgnl@jim.or.jp  
 調査・研究: stevent@jim.or.jp  
 まてりあ・広告: materia@jim.or.jp  
 会誌・欧文誌: editjt@jim.or.jp

公益社団法人日本金属学会  
 〒980-8544 仙台市青葉区一番町1-14-32  
 TEL 022-223-3685 FAX 022-223-6312  
<https://jim.or.jp/>

- ・投稿規程・出版案内・入会申込はホームページをご利用下さい。
- ・会告原稿締切: 毎月1日で、翌月号掲載です。
- ・掲示板や行事のご案内は、ホームページにも掲載しております。

## 会 告 (ホームページもご参照下さい)

## 2019年春期(第164回)講演大会ご案内ならびに参加申込みについて

会 期: 2019年3月20日(水)～3月22日(金)  
 会 場: 東京電機大学東京千住キャンパス(〒120-8551 東京都足立区千住旭町5)  
 懇親会: 2019年3月20日(水)18:00～20:00  
 会 場: 同大学1号館1階100周年ホール

### 参加申込要領

インターネットによる事前の大会参加申込みおよび懇親会参加の申込み: <締切> 2019年2月15日(金)

大会参加申込み URL <https://www.jim.or.jp/convention/2019spring/>

予約申込締切後、予約申込者へ大会参加証引換券、講演概要集DVDを送付します。懇親会の参加申込者には、懇親会参加券もあわせてお送りします。なお、領収書は、決済完了後に申込画面から各自印刷して下さい(WEB画面: 講演大会 MyPage よりダウンロード)。2月16日以降は当日申込となります。当日申込をご希望の方は、会場受付にて直接お申込下さい。

### ◆大会参加費(講演概要集DVD代含む)※年会費とは異なります。

参加費・講演概要集DVD・懇親会の消費税扱については、ホームページ(一覧表PDF)をご参照下さい。

予約申込締切日	2月15日(金)(申込および入金期日)	
	予約申込 (インターネット申込・事前支払い)	当日申込 (大会会場受付・現金払いのみ)
会員資格		
正員・維持員会社社員	10,000円	13,000円
学生員*	6,000円	7,000円
非会員 一般	24,000円	27,000円
非会員 学生(大学院生含む)	14,000円	16,000円

- ・お支払後の取消は、ご返金いたしかねますのでご了承下さい。
- ※ [学生員]: 卒業予定変更等により会員種別に相違がある場合、事前に会員種別の変更手続きを行ってから、大会参加をお申込下さい。
- ※ 非会員の(有料)参加申込者には、1年間「まてりあ」を寄贈するとともに、会員価格でイベント等(講演大会以外)に参加できる特典を付与いたします。ただし特典は重複して付与いたしません。

## ◆懇親会費(消費税込み)

予約申込締切日	2月15日(金)(申込および入金期日)	
種 別	予約申込 (インターネット申込・事前支払い)	当日申込 (懇親会会場受付・現金払いのみ)
一般	5,000円	7,000円
同伴者(ご夫人またはご主人)	3,000円	3,000円

・お支払後の取消は、ご返金いたしかねますのでご了承下さい。

## ◆支払方法

事前予約のお支払いはクレジットカードおよびコンビニ振込決済をご利用頂けます。また、入金後のご返金は致しかねます。2月15日(金)の入金日をもって予約申込完了となります。

## ◆参加証・講演概要集 DVD 発送

事前予約をされ、参加費を納入された方へは、講演概要集発行日3月6日に順次、「参加証引換券」、「講演概要集 DVD」、「懇親会参加証」を発送いたします。

## ◆講演概要集 DVD のみ購入する場合

件名を「2019年春期講演大会講演概要集 DVD 購入申込」とし、①申込者氏名②会員資格(会員番号も併記)③申込数④住所をご記入の上、E-mail: ordering@jim.or.jp 宛にお申込み下さい。3月6日の発行後、請求書を添えて送付いたします。

会員価：本体4,000円+税 定価：本体10,000円+税 送料：360円

## 参加申込・問合せ先

〒980-8544 仙台市青葉区一番町 1-14-32

(公社)日本金属学会 ☎ 022-223-3685 FAX 022-223-6312 E-mail: annualm@jim.or.jp

## ◆会期中の日程：

3月20日(水)	贈呈式、学会賞記念講演、本多記念講演、学術講演、ポスターセッション、懇親会
3月21日(祝・木)	学術講演、企業ランチョンセミナー
3月22日(金)	学術講演、男女共同参画ランチョンミーティング、第5回企業説明会

## ◆開催予定の各種シンポジウム：(プログラムは1月末ホームページ公開予定)

- S1. ミルフィーユ構造の材料科学Ⅱ
- S2. ワイドギャップ結晶の材料学と高温プロセッシング
- S3. プラストンの材料科学Ⅵ
- S4. ナノ・マイクロスペーステラリング
- S5. 材料技術史から見るこれからの技術展開Ⅱ
- S6. 金属表面の材料化学Ⅱ—めっき・耐食性・耐酸化性・触媒研究の新展開—
- S7. 材料機能特性のアーキテクチャー構築シンポジウムⅠ—マルチスケールにおける相界面の役割—
- K1\*. スピントロニクスとテラヘルツ光技術の融合(企画シンポジウム：依頼講演のみ)

## ◆主な期日

1 月末日	プログラム公開予定(ホームページ)
2 月15日(金)	参加予約締切
3 月1日(金)	まてりあ3号発行(プログラム発送)
3 月6日(水)	講演概要集 DVD 発行・発送(参加証)

～ ★ 皆様のご参加をお待ちしております。～

## 2019年春期講演大会併催企業説明会への学生参加者の募集

2019年春期講演大会に合わせ、学生のキャリアサポートの一環として本会主催により、日本金属学会・日本鉄鋼協会講演大会併催の第5回企業説明会を東京電機大学東京千住キャンパスにて開催します。本説明会は、学生にできるだけ多くの素材・材料関連企業に接してもらい、進路選択に役立ててもらおうというものです。日本金属学会学生会員及び日本鉄鋼協会学生会員並びに東京電機大学学生を対象に募集しますので、奮ってご応募下さい。

学生の皆さんが参加しやすいように講演大会期間の最終日に開催いたします。ほぼ終日ブースを開設して、講演の合間や講演終了後にも企業ブースを訪問できるようにするとともに、昼食(軽食)を提供して昼休み時間にブースを訪問しやすくしています。また、参加企業の担当者により詳しく情報交換できるように、説明会終了後に参加企業の担当者との交流会(立食懇親会)を開催します。

**開催日** 2019年3月22日(金)(春期講演大会の3日目)

**開催場所** 東京電機大学東京千住キャンパス(東京都足立区千住旭町5番)

**主催** 公益社団法人日本金属学会

**協賛** 東京電機大学学生支援センター、一般社団法人日本鉄鋼協会

**参加企業** 素材、材料関連の企業43社

**スケジュール** 11:00~16:30 ブース説明会(企業ブースでの対面説明)\***出入り自由**。昼食(軽食)提供。

17:00~18:30 参加企業担当者との交流会(立食懇親会、参加無料)\*ブース説明会のみ参加も可。

**応募資格** 日本金属学会学生会員、日本鉄鋼協会学生会員、東京電機大学大学生

**応募方法** 本会ホームページ上の参加申し込み画面(<https://data.jim.or.jp/jim/kigyou/>)から申し込む。

**募集期間** 2018年12月3日(月)~2019年3月8日(金)

**問合せ先** 公益社団法人日本金属学会 企業説明会担当(山村)

〒980-8544 仙台市青葉区一番町1-14-32 ☎ 022-223-3685 FAX 022-223-6312

E-mail: jim.company2019@jim.or.jp

### 〜 第5回企業説明会参加企業 〜

(50音順)

愛知製鋼株式会社	石福金属興業株式会社	株式会社住原製作所
大阪製鐵株式会社	高周波熱練株式会社	合同製鐵株式会社
株式会社神戸製鋼所	株式会社コベルコ科研	山陽特殊製鋼株式会社
JX 金属株式会社	JFE 条鋼株式会社	JFE スチール株式会社
昭和電線ホールディングス株式会社	新日鐵住金株式会社	新日本電工株式会社
住友金属鉱山株式会社	住友重機械工業株式会社	住友重機械ハイマテックス株式会社
大同特殊鋼株式会社	中越合金鋳工株式会社	中外炉工業株式会社
TRP 株式会社	TDK 株式会社	東京製鋼株式会社
株式会社東芝	東邦チタニウム株式会社	株式会社特殊金属エクセル
トビー工業株式会社	ニダック株式会社	日新製鋼株式会社
日鐵住金建材株式会社	日鉄住金 SG ワイヤ株式会社	日鉄住金テックロジー株式会社
日本軽金属株式会社	日本発条株式会社	日本冶金工業株式会社
日立金属株式会社	福田金属箔粉工業株式会社	古河電気工業株式会社
三井金属鉱業株式会社	三菱アルミニウム株式会社	三菱製鋼株式会社
ヤマハ発動機株式会社		

### 第7回ランチョンセミナー開催

春期講演大会の会期中に、第7回ランチョンセミナーを開催いたします。このセミナーは、参加者の皆様に講演大会の昼食時間を利用して昼食をとって頂きながら、企業による最新の技術情報を聴講いただく企画です。参加無料です。多くの皆様のご参加をお待ちしております。

**企画** 株式会社 明報社

**日時** 2019年3月21日(木) 昼休み時間

**会場** 東京電機大学東京千住キャンパス2号館日本金属学会講演会場

**参加費** 無料 昼食を無料提供いたします。

〜 皆様のご参加をお待ちしております!! 〜

**参加方法** 3月21日(木)8:30より参加券を「機器展示会場」にて配布致します。

金属学会、または鉄鋼協会の大会参加証をご提示下さい。引き換えにご希望のセミナー参加券をお渡し致します。

**参加企業** 詳細は2号にてご案内いたします。

### 第11回男女共同参画ランチョンミーティング 「金属材料分野での多様なキャリアパス」開催予告

金属材料分野でのキャリアパスとしてどのようなものがあるでしょうか。企業、大学、独法研究機関など様々です。また、一言で企業といっても様々な分野で活躍可能です。金属材料を学んだ先輩達がどのような進路で活躍しているか話を聞いてみませんか。仕事のこと、キャリアの積み上げ方、家庭のこと、気になるいろいろなことを、お昼を食べながら、気楽に質問してみてください。学生さん、若手の研究者、技術者の方、若い方にエールを送りたい方、大勢の方のご参加をお待ちしております。

**主催** 男女共同参画委員会日本金属学会・日本鉄鋼協会

**協賛** 男女共同参画学協会連絡会

**日時** 2019年3月22日(金)12:00~13:00

**会場** 東京電機大学東京千住キャンパス

**参加費** 無料 弁当30人分までは無料提供。  
(講演大会参加申込の有無にかかわらず、このミーティングに参加できます!!)

詳細は2号にてお知らせいたします。

## 2019年春期講演大会会期中の託児室設置の お知らせの予告

2019年春期講演大会会期中、日本金属学会と日本鉄鋼協会が共同で託児室を開いたします。

詳細は2号にてお知らせいたします。

### ■設置期間および利用時間(開始, 終了時間は予定です)

設置期間	利用時間
2019年3月20日(水)	8:30~17:30
3月21日(木)	8:30~17:30
3月22日(金)	8:30~16:45

■場所: 東京電機大学千住キャンパス内  
(詳細はお申し込者の方のみ, ご案内)

## 2019年春期講演大会機器・書籍・カタログ展示会出展募集 大会プログラム広告および 講演概要集 DVD ジャケット広告募集

2019年3月20日(水)~22日(金)の3日間、東京電機大学東京千住キャンパスにて開催される春期講演大会会場で機器・書籍およびカタログの有料展示会を開催いたします。あわせて講演大会プログラム、講演概要集 DVD ジャケット掲載の広告の募集もいたします。

### ■機器・書籍展示

研究開発用機器, 書籍, ソフトウェア等の出展を募集します。

1小間 間口1,800mm, 奥行き900mm(予定)

展示台(テーブル), 椅子, 電源(100V 1kWまで)をご用意します。

\*電気容量の追加は1kW毎に10,000円(税別)をご負担下さい。

出展料金 機器展示: 1小間140,000円(税別)

書籍販売: 1小間90,000円(税別)

申込締切 2019年2月1日(金)

### ■カタログ展示

展示部数 2点(A4サイズ, 8頁以内)につき, 30部以内

出展料金 2点につき30,000円(税別)(1点増すごとに10,000円(税別)追加)

申込締切 2019年2月1日(金)

### ■講演大会プログラム広告

原稿寸法 A4版 1P 天地260mm×左右180mm

1/2P 天地125mm×左右180mm

入稿原形態 完全データ(グレースケール)

#### 広告料金

掲載場所	頁	掲載料金
普通頁 後付	1	70,000円
後付	1/2	40,000円

○上記の料金には消費税は含まれておりません。

○原稿制作費は別途ご請求させていただきます。

申込締切 2019年1月31日(木)

原稿締切 2019年2月7日(木)

発行予定日 2019年3月1日(金)

### ■講演概要集 DVD ジャケット広告

原稿寸法 天地120mm×左右121mm

入稿形態 完全データ(4色カラー)

掲載場所	頁	掲載料金
表紙 2カラー	1	50,000円
表紙 4カラー	1	75,000円

○上記の料金には消費税は含まれておりません。

○原稿制作費は別途ご請求させていただきます。

申込締切日 2019年2月1日(金)

原稿締切日 2019年2月1日(金)

発行予定日 2019年3月6日(水)

### ■申込・問合せ先

〒104-0061 東京都中央区銀座7-12-4(友野本社ビル7F)

株式会社 明報社 担当 月岡太郎

☎ 03-3546-1337(代) FAX 03-3546-6306

E-mail: tsukioka@meihosha.co.jp

URL: http://www.meihosha.co.jp/

## 2019年秋期講演大会公募シンポジウムテーマ提案募集

提案期限: 2019年2月20日(水) 期日厳守

会員の研究活動一層の活性化を図ることを目的として、春秋大会において会員からの提案テーマによるシンポジウム講演を実施いたしており、活況を呈しております。明年の秋期大会の公募シンポジウムテーマを募集いたします。次の要領をご参照のうえ、活発な討論が期待できる有益なテーマを積極的にご提案下さい。(提案様式はホームページよりダウンロードして下さい。)

詳細 までりあ57巻12号640頁 or ホームページ → 講演大会 → お知らせ

問合せ・照会先 E-mail: stevent@jim.or.jp

☎ 022-223-3685 FAX 022-223-6312

日本金属学会講演大会委員会宛

## 2019年秋期講演大会企画シンポジウムテーマ提案募集

提案期限: 2019年2月20日(水) 期日厳守

最新の研究や技術を発信し、多くの研究者・技術者が集い交流する魅力ある講演大会を目指して、企画シンポジウムを実施しています。従来の公募シンポジウムとは違い、講演概要原稿の提出は問いません。講演発表は、一般(応募)講演枠は設けず、依頼講演および基調講演に限定いたします。下記要領をご参照のうえ、活発な討論が期待できる有益なテーマおよび他学会との連携企画等積極的にご提案下さい。(提案様式はホームページよりダウンロードして下さい。)

詳細 までりあ57巻12号640頁 or ホームページ → 講演大会 → お知らせ

問合せ・照会先 E-mail: stevent@jim.or.jp

☎ 022-223-3685 FAX 022-223-6312

日本金属学会講演大会委員会宛



## 各賞推薦(自薦)のお願い

◎下記の国会各賞のご推薦を申し上げます。ご推薦方法がWeb申込に変更されたものもございます。是非、ご利用の上、ご推薦下さい。

**【問合せ先】** 〒980-8544 仙台市青葉区一番町 1-14-32 (公社)日本金属学会 各種賞係 ☎ 022-223-3685 award@jim.or.jp

### 第17回学術貢献賞 候補者推薦のお願い

\*推薦書(様式)は、チェック項目を確認の上、ご提出下さい。

#### ■推薦要領

**候補者の対象** 各地域において金属学または金属工業に関する学術または技術の進歩発達に功労があった方。

**受賞人数** 各支部1名、但し関東支部と関西支部は1~3名程度  
受賞者の方には、秋期講演大会の折に受賞記念講演をお願いしております。

**推薦資格** 本会支部長、代議員または3名の正員連名による推薦

**推薦書記入方法**

- ① 所定の推薦書様式に合わせてご推薦願います。
- ② 最終学歴：卒業年次および学校名(学部名)を記入、また、大学院修了者は修了年次と大学名も併せて記入して下さい。
- ③ 本会活動の貢献：本会支部、本会の委員会、シンポジウム企画、セミナー企画、論文投稿等の活動実績を300字以内で入力する。
- ④ 業績の概要と推薦理由：1,000字以内にまとめ、入力する。

**推薦手続** 上記メール宛に「第17回学術貢献賞推薦」と明記し、お送り下さい。送信後2~3日過ぎても受理メールが無い場合はお問合せ下さい。(所定様式はホームページからダウンロードして下さい。)

**推薦締切** 2019年2月28日(木)

### 第17回功労賞 候補者推薦のお願い

~Webフォームによる推薦です!!~

#### ■推薦要領

**候補者の対象** 2019年5月31日時点で45歳以上で65歳以下の研究者、技術者。

**対象部門** 学術部門：金属学または金属工業に関する学術の進歩発達に功労があった方  
技術部門：金属学または金属工業に関する技術の進歩発達に功労があった方

**対象部門** 「学術部門」「技術部門」

**推薦資格** 本会代議員または3名の正員連名による推薦

**推薦方法** 下記URLの推薦フォームにより入力して下さい。

1. 推薦フォーム
  - 推薦者資格を選択する。
  - 入力項目は、全て必須。
  - 応募部門：2部門から該当する部門を選択する。
  - 最終学歴：卒業年次および学校名(学部名)を入力、また、大学院修了者は修了年次と大学名も併せて入力する。
  - 本会活動の貢献：本会の委員会、シンポジウム企画、セミナー企画、論文投稿等の活動実績を300字以内で入力する。
2. 業績の概要と推薦理由：1,000字以内にまとめ、入力する。
3. 論文リスト
  - 特に主要な論文を「原著論文」「解説論文」「国際会議論文」に分別し、計15編以内を選び、論文題目、発表誌名、巻号頁、共著者を入力する。

**登録完了** 推薦者のメールアドレス宛に登録完了通知を送信します。

**推薦締切** 2019年2月28日(木)

**推薦URL** <https://kourou.jim.or.jp/entry>

### 第29回奨励賞 候補者推薦のお願い

~Webフォームによる推薦です!!~

#### ■推薦要領

**候補者の対象** 2019年5月31日時点で33歳以下の方で、金属・材料工学ならびに関連分野で卓越した業績を挙げつつある研究者。工業技術部門は企業の研究者または技術者を対象とします。

**対象部門** 物性、組織、力学特性、材料化学、材料プロセッシング、工業材料、工業技術部門の7部門

**推薦資格** 本会代議員、講演大会委員または3名の正員連名による推薦

**推薦方法** 下記URLの推薦フォームにより入力して下さい。

1. 推薦フォーム
  - 推薦者資格を選択する。
  - 入力項目は、全て必須。
  - 応募部門：7部門から該当する部門を選択する。
  - 最終学歴：卒業年次および学校名(学部名)を入力、また、大学院修了者は修了年次と大学名も併せて入力する。
  - 本会活動の貢献：本会の委員会、シンポジウム企画、セミナー企画、論文投稿等の活動実績を300字以内で入力する。
2. 業績の概要と推薦理由
  - 1,000字以内にまとめ、入力する。
  - 工業技術部門は企業人としての実績(特許・社内表彰等)も入力する。
3. 論文リスト
  - 特に主要な論文を「原著論文」「解説論文」「国際会議論文」に分別し、計15編以内を選び、論文題目、発表誌名、巻号頁、共著者を入力する。

**登録完了** 推薦者のメールアドレス宛に登録完了通知を送信します。

**推薦締切** 2019年2月28日(木)

**推薦URL** <https://shourei.jim.or.jp/entry>

### 第16回村上奨励賞 候補者推薦のお願い

~Webフォームによる推薦です!!~

#### ■推薦要領

**候補者の対象** 金属工学の分野で卓越した業績を挙げつつある、2019年5月31日時点で40歳以下の若手研究者。

**推薦資格** 本会代議員、講演大会委員または3名の正員連名による推薦

**受賞人数** 若干名

**推薦方法** 下記URLの推薦フォームにより入力して下さい。

1. 推薦フォーム
  - 推薦者資格を選択する。
  - 入力項目は、全て必須。
  - 最終学歴：卒業年次および学校名(学部名)を入力、また、大学院修了者は修了年次と大学名も併せて入力する。
  - 本会活動の貢献：本会の委員会、シンポジウム企画、セミナー企画、論文投稿等の活動実績を300字以内で入力する。
2. 業績の概要と推薦理由：1,000字以内にまとめ、入力する。
3. 論文リスト
  - 特に主要な論文を「原著論文」「解説論文」「国際会議論文」に分別し、計15編以内を選び、論文題目、発表誌名、巻号頁、

共著者を入力する。

登録完了 推薦者のメールアドレス宛に登録完了通知を送信します。

推薦締切 2019年2月28日(木)

推薦 URL <https://murasho.jim.or.jp/entry>

## 第67回論文賞 候補論文推薦(自薦)のお願い

\*論文賞推薦書(様式)は、チェック項目をご確認の上、ご提出下さい。

### 第67回論文賞の対象論文

日本金属学会誌：第82巻1～12号(2018年)掲載分

Materials Transactions：Vol. 59 No. 1～12(2018年)掲載分

注：次の要件をすべて満たした原著論文を対象といたします。

- (1) 日本金属学会誌掲載論文は、「学術論文」又は「技術論文」のカテゴリーに属する論文であること。  
Materials Transactions 掲載論文は、「Regular Article」又は「Technical Article」のカテゴリーに属する論文であること。
- (2) Materials Transactions に英文発表後1年以内に日本金属学会誌に掲載された論文若しくは日本金属学会誌に掲載後1年以内に Materials Transactions に掲載された論文ではないこと。
- (3) コピーライトが本会に帰属されていること(本会に著作権を委譲している論文)。
- (4) 推薦数の要件
  - ①推薦者は、同じ論文を複数の部門に推薦することはできない。
  - ②1名の推薦者がこの賞に推薦出来る論文数は、一部門につき1論文である。

推薦方法 下記 URL のフォームにより推薦内容を入力して下さい。

1. 論文題名
2. 著者名
3. 掲載巻・号・頁
4. 対象部門(物性、組織、力学特性、材料化学、材料プロセス、工業材料の中から選択) 掲載された部門で選考されます
5. 推薦理由(300～400字)
6. 推薦者名(勤務先・連絡先 TEL・E-mail も記入下さい)

登録完了 推薦者のメールアドレス宛に登録完了通知を送信します。

推薦締切：2019年2月28日(木)

照会先 会誌・欧文誌編集委員会 E-mail: editjt@jim.or.jp

推薦 URL <https://data.jim.or.jp/jim/shou/>

## 第9回までりあ賞 推薦(自薦)のお願い

### ■第9回「までりあ賞」推薦要領

#### (1) までりあ論文賞

日本金属学会会報「までりあ」に掲載した論文で、学術または科学技術上優秀で且つ金属およびその周辺材料に係る分野の進歩発展に顕著な貢献をした論文に対し授賞する。

#### (2) までりあ啓発・教育賞

日本金属学会会報「までりあ」に掲載した記事で、までりあ記事の特徴を活かし、金属およびその周辺材料に係る啓発や教育に顕著な貢献をした記事に対し授賞する。

授賞対象記事 2016年～2018年掲載済記事(授賞済記事は除く：授賞済記事はホームページに掲載します。)

- 記事種別 (1) までりあ論文賞：解説、最近の研究、技術資料、集録、新進気鋭、特集記事、物性・技術データ最前線、プロジェクト報告
- (2) までりあ啓発・教育賞：講義ノート、入門講座、プロムナード、実学講座、材料教育、材料科学のハイオニアたち

授賞 2019年秋期講演大会(岡山大学)にて。

推薦資格 「会報編集委員」または「著者ご本人」あるいは「正員3名以上の連名」

推薦方法 ①種別②タイトル③著者名④掲載巻号頁⑤推薦理由(300～400字)⑥推薦者名をオンラインで入力する。ホームページ：「までりあ」より入力して下さい。または、郵送・FAX、E-mail で送信する。

推薦締切 2019年2月28日(木)

推薦 URL <https://data.jim.or.jp/jim/materiashou/ronbun/>  
<https://data.jim.or.jp/jim/materiashou/kyoiku/>

申込問合先 会報編集委員会 E-mail: materia@jim.or.jp



## ～2019年度の会費お払込について～

2019年度の会費お払込のお手続きはお済みでしょうか。会員の皆様には、既にお手続きのご案内をお送りいたしておりますが、お手続きが未だの方は、ご対応をお願いいたします。

尚、本会ホームページの[会員専用ページ](#)からは支払いの確認や、クレジットカード決済などができます。また、ご連絡先住所の変更もこのページからできますのでご利用下さい。

JIM ホームページ

入会・会員 → [会員マイページ](#) → ID & パスワード入力 → 会費決済 or 各種変更届手続きへ

## 高温酸化腐食の基礎—熱力学・動力学を中心とした腐食の理解—

【協賛】(一社)日本鉄鋼協会, (公社)腐食防食学会, (一社)表面技術協会

2018年に開催された高温酸化・腐食の国際会議「ISHOC2018」において、金属材料の高温酸化・腐食の原理原則についての知識の継承とレベルアップの必要性が求められるとともに、高温酸化腐食の分野における最近の展開に関する解説を行うセミナーの開催が望まれた。本セミナーでは、高温酸化・腐食を専門とする学术界および産業界からの講師陣に、高温酸化・腐食現象を基礎から解説いただくとともに、産業界における高温腐食に関する最近の話題や問題点を紹介頂くことにより、若手技術者や研究者をはじめとして、本分野全体のレベルアップを図ることを目的としている。

(企画世話人 北海道大 林 重成, 長岡技大 南口 誠, 新日鐵住金 西本 工)

日 時 2019年1月22日(火) 9:30~17:00

場 所 東京工業大学大岡山キャンパス蔵前会館内ロイヤルブルーホール  
(東京都目黒区大岡山 2-12-1 東急大井町線大岡山駅 徒歩2分)

募集定員 100名

受講料(消費税込み)

受講資格	事前申込	当日申込
正員	12,000円	15,000円
学生	5,000円	6,000円
非会員	15,000円	20,000円

(本会前維持員会社社員, 協賛学会会員は会員扱い。学生は会員, 非会員の区別なし)

申込要領 E-mailで meeting@jim.or.jp 宛お申し込み下さい。申込項目は以下のとおりです。

①送信 subjectに「セミナー高温酸化腐食の基礎」と記入, ②氏名, ③会員・非会員・学生の区別(本会会員は会員番号も), ④勤務先・所属, ⑤通信先住所(テキスト等送付先と電話番号)申込受理確認のE-mailを返信します。

事前申込締切 2019年1月15日(火)着信

テキストの送付 当日配布となります。

受講料払込方法 お申込受理後、請求書を送付いたします。

問 合 先 〒980-8544 仙台市青葉区一番町 1-14-32

(公社)日本金属学会 セミナー参加係

E-mail: meeting@jim.or.jp ☎ 022-223-3685 ☎ FAX 022-223-6312

### プログラム

9:30~10:10	高温酸化・腐食の熱力学(状態図を活用するには)	北大 林 重成
10:10~10:50	高温酸化の速度論(スケールおよび合金中の物質移動)	東工大 上田光敏
10:50~11:00	一休 憩—	
11:00~11:40	高温腐食(熔融塩)の基礎	新日鐵住金 西本 工
11:40~12:20	炭素系ガスによる腐食の基礎	新日鐵住金 西山佳孝
12:20~13:20	一昼 食—	
13:20~14:00	酸化物, 酸化皮膜の機械的特性	長岡技科大 南口 誠
14:00~14:40	耐酸化コーティングと基材の相互作用, 機械的特性	神鋼溶接サービス 笠井一輝
14:40~14:50	一休 憩—	
14:50~15:30	耐熱合金のホットコロージョン, SO <sub>2</sub> ガス腐食	IHI 松永康夫
15:30~16:10	実環境(焼却プラント)における熔融塩・塩化腐食	荏原製作所 野口 学
16:10~16:20	一休 憩—	
16:20~17:00	酸化動力学の新たな測定法とその展開	秋田大 福本倫久

(各講義には10分程度の質疑応答時間を含む)



## 転位を知る —金属・合金における強度・延性の担い手—

日本金属学会「セミナー・シンポジウム委員会」企画

【協賛】 (一社)日本鉄鋼協会, (一社)軽金属学会, (一社)日本機械学会, (一社)日本計算工学会 日本学術振興会第176委員会

日時 2019年1月29日(火)13:30~16:30, 1月30日(水)9:30~16:30

場所 東京工業大学 田町キャンパス(国際会議室)(〒108-0023 東京都港区芝浦 3-3-6)

事前申込締切 2019年1月10日(木)着信

詳細 までりあ12号642頁または本会ホームページ「イベント」→「セミナー」

募集定員 60名

プログラム(予定):

**【第1日目 13:30~16:30】**

1. 結晶欠陥としての転位の概念 [1章]
2. 弾性論の基礎 [2章]
3. 転位の弾性論 [4章]
4. 転位に働く力 [5章]

**【第2日目 9:30~12:00】**

5. 外部応力および内部応力下での転位の形状 [10章]
6. 転位の結晶学 [7章]
7. 転位の増殖, 切り合いと堆積 [6章]

— 昼食・休憩 — 12:00~13:00

講師: 藤居俊之(東工大教授), 村石信二(東工大准教授), 岸田恭輔(京大准教授), 小山敏幸(名大教授)

問合せ先 〒980-8544 仙台市青葉区一番町 1-14-32

(公社)金属学会セミナー(特別講座) 参加係 E-mail: meeting@jim.or.jp ☎ 022-223-3685 FAX 022-223-6312

**【第2日目 13:00~16:30】**

8. 転位の熱活性化運動 [8章]
  9. 塑性変形の転位論 [9章]
  10. 強化機構 [11章]
  11. 変形の熱力学 [3章]
- ([ ]内は, テキストの章番号)

### 支部行事



**日本金属学会・日本鉄鋼協会 東海支部  
若手材料研究会  
第75回 『電池材料研究の最近の動向』**

日本金属学会・日本鉄鋼協会 東海支部 若手材料研究会では、『電池材料研究の最近の動向』と題しまして, 下記の要領で研究会を開催致します。懇親会も併せまして, 多数の皆様のご出席を賜りたく, ご案内申し上げます。講演の概要はホームページをご覧ください。

日時 2019年1月15日(火) 13:00~17:30

場所 名古屋工業大学 4号館ホール(名古屋市中昭和区御器所町, 最寄駅: JR 鶴舞駅)

**研究会プログラム**

- 13:00~13:05 開会の挨拶
- 13:05~14:05 (講演:50分, 質疑応答:10分)  
液相法による硫化物系電解質の簡便合成と全固体リチウム電池への応用 豊橋技科大 松田厚範
- 14:05~15:05 (講演:50分, 質疑応答:10分)  
酸化物系無機固体電解質上で起こるリチウム金属の析出溶解反応 名大 本山宗主
- 15:05~15:25 ~休憩~
- 15:25~16:25 (講演:50分, 質疑応答:10分)  
ナトリウムイオン電池およびカリウムイオン電池用イオン液体電解質の開発 京大 山本貴之
- 16:25~17:25 (講演:50分, 質疑応答:10分)  
固体酸化物形燃料電池の新しい応用の可能性と  
そのための材料とプロセス 中部大 橋本真一

17:25~17:30 閉会の挨拶

18:00(予定) ~懇親会(会場未定)

定員 100名(定員になり次第, 締め切らせて頂きます。)

参加費 無料

懇親会参加費 未定(4,000~5,000円の予定)

申込方法 下記の申込み先へメールにて, **2019年1月7日(月)**までに, 所属, 氏名, E-mail, TEL, 懇親会出欠をメールの本文に明記の上, お申込み下さい。また, メール件名は「第75回若手材料研究会参加申込み」と記載して下さい。

申込・問合せ先 〒466-8555 愛知県名古屋市中区御器所町  
名古屋工業大学 物理工学専攻  
宮崎怜雄奈  
E-mail: miyazaki.reona@nitech.ac.jp  
☎ 052-735-5505

担当幹事 名古屋工業大学 宮崎怜雄奈, 愛知製鋼株式会社  
松浦幸太郎

### 学術討論会

テーマ 「将来のクルマを支える材料技術(その2: 機能性材料を中心に)」

開催日時 2019年1月21日(月)13:00~18:00

開催場所 名古屋大学 ES 総合館1階 ES ホール

詳細は, 本会ホームページ → イベント → 東海支部行事をご覧ください。

# 掲 示 板

## 〈公募類記事〉

無料掲載：募集人員、締切日、問合せのみ掲載。

有料掲載：1/4頁(700～800文字)程度。

・「まてりあ」とホームページに掲載；15,000円＋税

・ホームページのみ掲載；10,000円＋税

〈その他の記事〉 原則として有料掲載。

・原稿締切・掲載号：毎月1日締切で翌月号1回掲載

・原稿提出方法：電子メールとFAX両方(受け取りメールの確認をして下さい)

・原稿送信先：FAX 022-223-6312 E-mail: materia@jim.or.jp

## ◇最先端の顕微鏡と理論計算に関する国際シンポジウム◇

The 6th International Symposium on Advanced Microscopy and Theoretical Calculations (AMTC-6)

主 催 一般財団法人ファインセラミックスセンター

共 催 文部科学省科研費特別推進研究

「原子・イオンダイナミクスの超高分解能直接観察に基づく新材料創成」

会 期 2019年6月14日(金)～15日(土)

会 場 ウィンクあいち <http://www.winc-aichi.jp/access/>

(〒450-0002 名古屋市中村区名駅4-4-38)

### 概 要

本シンポジウムの趣旨は、電子顕微鏡をはじめとする先端の顕微鏡・理論計算、および材料開発・解析の最新技術とその成果について深く議論する場を提供することです。材料特性はそのナノ構造に大きく依存します。界面、表面、欠陥、構造欠陥と相互作用する不純物/ドーパントといった格子不整合領域は材料特性の発現において重要な役割を担います。現在、最先端の電子顕微鏡技術、理論計算技術を用いることで、構造と材料特性の因果関係を原子レベルで定量的に解析することが可能となってきました。これらの解析方法で得られる情報は、優れた機能を有する新材料の合理的な設計を可能にし、材料創出のアイデアを呼び起こすものであります。究極的には地球環境の保護、社会の持続的発展に大きく貢献すると考えております。本シンポジウムで最先端情報の入手と意見交換を行うことを通じて、大学・研究機関・企業で現在活躍する研究者、将来を担う学生など全ての参加者がイノベーションを生み出す有意義な機会を得ることを期待しております。

トピックス 最先端の顕微イメージング・計測/機能性材料のその場観察・解析/材料科学のフロンティア/モデリング・シミュレーション

参加費 無料/バンケット：3,000円

申込方法 下記 Web サイトからお申し込み下さい。

<http://amtc6.com>

予稿原稿締切 2019年3月4日(月)

問合せ 株式会社インターグループ 名古屋支社 鈴木健吾

一般財団法人ファインセラミックスセンター

川崎忠寛

☎ 052-581-3241 FAX 052-581-5585

E-mail: amtc6@intergroup.co.jp

## ◇レアメタル研究会◇

■主 催 レアメタル研究会

主宰者 東京大学生産技術研究所 教授 岡部 徹

協 力 (一財)生産技術研究奨励会(特別研究会 RC-40)

共 催 東京大学マテリアル工学セミナー

レアメタルの環境調和型リサイクル技術の開発研究会

東京大学生産技術研究所 持続型エネルギー・材料統合研究センター

東京大学生産技術研究所 非鉄金属資源循環工学寄付

研究部門(JX 金属寄付ユニット)

協 賛 (公社)日本金属学会他

■開催会場 東京大学生産技術研究所 An棟 2F コンベンション

ホール 〒153-8505 目黒区駒場4-6-1

(最寄り駅：駒場東大前、東北沢、代々木上原)

<https://www.iis.u-tokyo.ac.jp/ja/access/>

■参加登録・お問い合わせ

岡部研 レアメタル研究会事務担当 宮寄智子

(okabelab@iis.u-tokyo.ac.jp)

〈平成30年度 レアメタル研究会開催予定のご案内〉(2018.12.11現在)

■第84回 2019年1月11日(金)

★貴金属シンポジウム(第6回)+新年会(合同開催)

■第85回 2019年3月8日(金)

★佐藤修彰教授と藤田豊久教授が熱く語る特別シンポジウム+慰労会★(合同開催)

■第84回 2019年1月11日(金) 14:00～An棟2F コンベンションホール

★貴金属シンポジウム(第6回)+新年会★(合同開催)

テーマ：貴金属の製錬・リサイクル

時 間：午後2:00～

講 演：【敬称略】

・三井串木野鉱山における貴金属回収

三井串木野鉱山株式会社 生産部長 川下幸夫 講師

・直島製錬所の貴金属製錬操業について

三菱マテリアル株式会社 直島製錬所 貴金属課 課長 宇野貴博 講師

・貴金属湿式精錬プロセスにおける金回収について

住友金属鉱山株式会社 金属事業本部 東子工場 技術課 課長 一色靖志 講師

・ポスター発表者によるショートプレゼン(希望者)

・Auの乾式分析について

アサヒブリック株式会社 研究開発部 分析グループ 田村信也 講師

・佐賀製錬所におけるRe回収について

パンパシフィック・カッパー株式会社 佐賀製錬所 製造部 硫酸課 課長 佐藤晋哉 講師

・田中貴金属工業における燃料電池用触媒開発

田中貴金属工業株式会社 化学回収カンパニー FC触媒開発センター チーフマネージャー 松谷耕一 講師

・松田産業におけるリサイクルの取り組み —LIBを中心として—

松田産業株式会社 生産統括本部 技術部 技術課 課長代理 浦田泰裕 講師

・About Umicore Precious Metals Refining

Umicore Precious Metals Refining Supply Manager Industrial By-Products Dr. Jeroen Heulens

午後6:30～ 交流会兼ポスター発表(An棟1Fレストラン アーベ)

■第85回 2019年3月8日(金) 14:00～

会場変更：駒場IIキャンパス 先端科学技術研究センター3号館南棟1階 ENEOS ホール

★佐藤修彰教授と藤田豊久教授が熱く語る特別シンポジウム+

慰労会★(合同開催)

テーマ: ご卒業講演: 佐藤先生, 藤田先生の研究と活動, 非鉄業界と研究の将来

展望

時間: 午後2:00~

講演:

- 稀有なレアメタル実験室(60分)  
東北大学 多元物質科学研究所 教授 佐藤修彰 講師
  - 講師依頼中(40分)
  - 演題未定(60分)  
東京大学 工学系研究科 システム創成学専攻 教授 藤田豊久 講師
- 午後6:00~ 研究交流会・意見交換会(S棟プレゼンテーションルームに変更)

\*レアメタル研究会ホームページ\*

[https://www.okabe.iis.u-tokyo.ac.jp/japanese/rc40\\_j.html](https://www.okabe.iis.u-tokyo.ac.jp/japanese/rc40_j.html)

## 電子ジャーナル機関購読のご案内

機関(IPアドレス)認証による電子ジャーナルのご購読が可能となっております。ご利用下さい。

対象誌 日本金属学会誌, Materials Transactions

年間購読料金 別途お知らせいたします。お問合せ下さい。

対象機関 大学類, 独立行政法人, 企業等

問合せ先 〒105-0022 東京都港区海岸 1-9-18 国際浜松町ビル  
丸善雄松堂株式会社 学術情報ソリューション事業部  
外国雑誌・eリソースセンター

☎ 03-6367-6114 FAX 03-6367-6184

E-mail: epro-j@maruzen.co.jp

## 日本金属学会誌掲載論文 Vol. 83, No. 1 (2019)

— 論 文 —

鉄系軟磁性材料における磁化曲線の圧縮応力依存性  
イジュラル ハシフ 島田宗勝 久保田 健

高強度鋼板の重ねすみ肉溶接継手の静的強度に及ぼす  
アーク溶接後の経過時間の影響  
富士本博紀 阪本晃樹 巽 雄二郎

Pb フリー Cu 合金とその晶出物である Cu<sub>2</sub>S および  
Bi の腐食挙動  
安田吉伸 阿部弘幸 松林良蔵 丸山 徹 春名 匠

固体王水を用いた使用済み触媒からの白金回収に関する  
基礎的研究  
吉村彰大 松野泰也

鍛造 Fe-Ni 基合金 HR6W における時効析出挙動  
井和丸 新 久澤大夢 寺田芳弘

## Materials Transactions 掲載論文 Vol. 60, No. 1 (2019)

—Special Issue on New Casting Process and New  
Simulation Method for Casting—

### PREFACE

Effect of Solidification Conditions on the Deformation Behavior of Pure Copper Castings  
Ikuzo Goto, Setsuo Aso, Ken-ichi Ohguchi,  
Kengo Kurosawa, Hiroyuki Suzuki,  
Hiroyuki Hayashi and Jun-ichi Shionoya

Anisotropic Mechanical Properties of Columnar and Equiaxed A6005C Aluminum Alloys Fabricated by Capillary Shaping  
Jun Yaokawa, Yasushi Iwata and Yuichi Furukawa

## High-Temperature Mechanical Properties of NaCl-Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> Salt-Mixture Removable Cores for Aluminum Die-Casting

Katsunari Oikawa, Kazuhiro Sakakibara,  
Yoji Yamada and Koichi Anzai

## Solidification Simulation of Pure Metal Castings by Considering the Effects of Shrinkage Cavity Formation Process on Heat Transfer Behavior

Ikuzo Goto, Kohei Tomita and Setsuo Aso

## Heat Transfer and Solidification Analysis Using Adaptive Resolution Particle Method

Naoya Hirata and Koichi Anzai

## Ultrafine Spheroidal Graphite Iron Castings

Haruki Itofuji, Kazuya Edane, Tomokatsu Kotani,  
Masayuki Itamura and Koichi Anzai

—Regular Article—

### Materials Physics

## Preparation of Double-Shelled Fluorescent Silicon Nanocrystals and Fabrication of Its Thin Layer by Electrophoretic Deposition Process

Naoto Shirahata, Tetuo Uchikoshi, Thi Kim Ngan Nguyen,  
Yoshitake Masuda and Yoshio Sakka

## Simulation of Exchange Bias by Two-Phase Ferromagnetic Model Using Antiferromagnetic Interlayer Coupling for the Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> Thin Film

M. Yoneda, S. Obata, M. Niwa, N. Hirata and M. Motohashi

### Microstructure of Materials

## Effect of Temperature on Phase Transformation and Leaching Behavior of Acid Mine Drainage Sludge

Mei Liu, Atsushi Iizuka and Etsuro Shibata

### Mechanics of Materials

## Relationship among Elongation, Work Hardening Behavior and Dislocation Characteristics of Al-Mg-Si Series Alloys

Yuki Koshino, Yasuhiro Aruga,  
Junpei Mukai and Kenji Kaneko

**Effect of Post Heat Treatment on the Mechanical Properties of Porous Ti-6Al-4V Alloys Manufactured through Powder Bed Fusion Process**

Xue-Zheng Yue, Hiroshi Fukazawa, Kazuya Maruyama, Keiji Matsuo and Koichi Kitazono

**Change in Slip Mode with Temperature in Ti-0.49 mass%O**

Masaki Tanaka, Yukihiko Hayashi, Yelm Okuyama, Tatsuya Morikawa and Kenji Higashida

**Grain-Boundary Sliding and Its Accommodation at Triple Junctions in Aluminum and Copper Tricrystals**

Tatsuya Okada, Hiromu Hisazawa, Akihiro Iwasaki, Shota Amimoto, Jun Miyaji, Masaki Shisawa and Tomoyuki Ueki

**Effects of Nickel, Phosphorous and Sulfur on the Post-Irradiation Annealing Behavior of Irradiation Hardening in Fe-0.2 mass% C-0.3 mass% Cu Model Alloys**

Hiroshi Shibamoto, Akihiko Kimura, Masayuki Hasegawa and Hideki Matsui

**Theoretical Calculations of Characters and Stability of Glide Dislocations in Zinc Sulfide**

Masaya Ukita, Ryota Nagahara, Yu Oshima, Atsutomu Nakamura, Tatsuya Yokoi and Katsuyuki Matsunaga

**Processing and Mechanical Properties of a Tricalcium Phosphate-Dispersed Magnesium-Based Composite**

Hiroyuki Watanabe, Naoko Ikeo and Toshiji Mukai

**Materials Chemistry**

**Thermodynamic Properties for  $\text{Nd}_2(\text{MoO}_4)_3$  Formed in the Nuclear Fuel Waste Glasses**

Yoshiki Kinoshita, Masao Morishita, Ai Nozaki and Hiroaki Yamamoto

**Materials Processing**

**Lap Joint of 6061 Aluminum Alloy Sheet and DP590 Steel Sheet by Magnetic Pulse Welding and Characterization of Its Interfacial Microstructure**

Takaomi Itoi, Shoichi Inoue, Kouki Nakamura, Syunichi Kitta and Keigo Okagawa

**Development of Electrodeposition Process Based on Chloride Electrolytes for Bulk Pure Fe with Plastic Deformability**

Yu Ogura, Mizuki Kanetake, Isao Matsui, Yorinobu Takigawa, Tokuteru Uesugi and Kenji Higashi

**Effect of Processing Conditions on Microstructure and Thermal Conductivity of Hot-Extruded Aluminum/Graphite Composites**

Li-Fu Yi, Noriaki Yoshida, Tetsuhiko Onda and Zhong-Chun Chen

**Engineering Materials and Their Applications**

**Effects of Autogenous Bone Graft on Mass and Quality of Trabecular Bone in Ti-6Al-4V Spinal Cage Fabricated with Electron Beam Melting**

Hiroyuki Takahashi, Takuya Ishimoto, Takayuki Inoue, Hiroomi Kimura, Keita Uetsuki, Natsuki Okuda, Yohei Nakanishi, Jong Yeong Oh, Manabu Ito, Yoshio Nakashima, Takao Hanawa and Takayoshi Nakano

**Crack-Healing Behavior and Mechanical Strength Recovery of 5 vol% Silicon Carbide Particle Dispersed Yttrium Monosilicate Composites**

Huy D. Vu and Makoto Nanko

**Tribological Behavior of Borided AISI 316L Steel with Reduced Friction Coefficient and Enhanced Wear Resistance**

Enrique Hernández-Sánchez, Julio C. Velázquez, José. L. Castrejón-Flores, Alexis Chino-Ulloa, Itzel P. Torres Avila, Rafael Carrera-Espinoza, Jorge A. Yescas-Hernández and Carlos Orozco-Alvarez

*—Rapid Publication—*

**Effect of Initial Microstructures on Austenite Formation Behavior during Intercritical Annealing in Low-Carbon Steel**

Hiroyuki Dannoshita, Toshio Ogawa, Kuniaki Maruoka and Kohsaku Ushioda



～ 日本金属学会誌および Materials Transactions のオンライン・ジャーナル化のお知らせ ～

日本金属学会誌および Materials Transactions は、将来的な論文のマルチメディア対応を視野に、2019年1号より、オンライン・ジャーナル化となりました。これにより、冊子は購読希望者に実費にて頒布することとなり、購読費、掲載論文のカラー図表および別刷の取り扱いについても変更となりました。変更内容の詳細は、昨年までの57巻9号(459頁)または本会ホームページ(会誌または Mater.Trans. のページ)にございますので、ご確認をお願い申し上げます。



まてりあ 第58巻 2号 予告

特集「顕微鏡法による材料開発のための微細構造研究最前線(11)」  
～顕微鏡法の材料評価への展開と先端評価法の進展～Part2\*

\* Part1 の掲載は57巻12号です。

新技術・新製品  
—他—

(編集の都合により変更になる場合があります)

# 行事カレンダー

太字本会主催(ホームページ掲載)

開催日	名称・開催地・掲載号	主催	問合せ先	締切
<b>2019年1月</b>				
8～9	研究会「第9回プラストンに基づく変形現象研究会～ナノストラクチャ形成と変形・破壊メカニズム～」(京大)	研究会 No. 70・大石(京大)	TEL 075-753-5573 FAX 075-753-5578 admin@esism.kyoto-u.ac.jp	
10	北海道支部合同冬季講演大会(室蘭工大)(11号571頁)	北海道支部・吉田(新日鐵住金)	TEL 0143-47-2651 FAX 0143-47-2760 mu_tekkyo@jp.nssmc.com	11.30
10～11	“つける”と“はがす”の新技术-分子接合と表面制御コース(川崎)	神奈川県立産業技術総合研究所	TEL 044-819-2033 ed@newkast.or.jp	定員 20名
11	レアメタル研究会(東大生産技研)(本号59頁)	レアメタル研究会	TEL 03-5452-6314 tmiya@iis.u-tokyo.ac.jp http://www.okabe.iis.u-tokyo.ac.jp/ japanese/index_j.html	
11	第33回軽金属セミナー「アルミニウム合金の組織—中級編(時効析出)」(第7回)(日本大学)	軽金属学会	TEL 03-3538-0232 http://www.jilm.or.jp/	定員 40名
11～12	第50回応力・ひずみ測定と強度評価シンポジウム(東京)	日本非破壊検査協会(東京)	TEL 03-5609-4015 gamou@jsndi.or.jp	
15	東海支部 若手材料研究会「電池材料研究の最近の動向」(名工大)(本号58頁)	東海支部	TEL 052-735-5505 miyazaki.reona@nitech.ac.jp https://jim.or.jp/	
16～17	第57回セラミックス基礎科学討論会(仙台)	日本セラミックス協会基礎科学部会	TEL 022-795-7965 takahashi@laser.apph.tohoku.ac.jp http://www.ceramic.or.jp/bkiso	
18	炭素材料学会1月セミナー「気相法を利用したユニークなエネルギーデバイス用材料の合成と評価」(東京)	炭素材料学会	TEL 03-3368-2827 tanso-desk@bunken.co.jp http://www.tanso.org/contents/event/ seminar/january_2019.html	
18	表面科学技術研究会2019「今、その界面はどうなっているか?—分光法で解き明かす電極界面の素顔—」(大阪)	日本表面技術協会 関西支部他	TEL 079-247-4911 yae@emg.u-hyogo.ac.jp http://www.sssj.org/Kansai	1.18
21	東海支部 学術討論会(将来のクルマを支える材料技術)(名大)(本号58頁)	東海支部	tokai@numse.nagoya-u.ac.jp https://jim.or.jp/	1.11
21	第14回SPRING-8金属材料評価研究会/第35回SPRING-8先端利用技術ワークショップ(東京)	SPRING-8利用推進協議会	suishin@spring8.or.jp	定員 70名
22	金属学会セミナー「高温酸化腐食の基礎-熱力学・動力学を中心とした腐食の理解-」(東京)(本号57頁)	日本金属学会	TEL 022-223-3685 FAX 022-223-6312 meeting@jim.or.jp https://jim.or.jp/	1.15
22～23	表面科学セミナー2019「実践! マテリアルインフォマティクス 実際の作業を通して身につける材料データ科学」(東京理科大)	日本表面真空学会	TEL 03-3812-0266 office@jvss.jp https://www.jvss.jp	1.18
24	第221回研究会 回転機用磁性材料の技術と応用(中央大)	日本磁気学会	TEL 03-5281-0106 https://www.magnetics.jp/event/research/ topical_221/	
24～25	第47回ガスタービンセミナー(帝京大)	日本ガスタービン学会	gtsj-office@gtsj.org http://www.gtsj.org/	
25	チタン製造プロセスと材料機能研究会第5回講演会「新しいチタン製造プロセス」(関西大学)(12号641頁)	No.74 チタン製造プロセスと材料機能研究会/上田(東北大)	TEL/FAX 022-795-7295 ueda@materiaal.tohoku.ac.jp	1.14
25	第4回海事三学会合同シンポジウム「海事分野におけるイノベーション」(東京)	日本船舶海洋工学会他	TEL 03-3438-2014	1.15
25～26	第24回電子デバイス界面テクノロジー研究会—材料・プロセス・デバイス特性の物理—(三島)	応用物理学会薄膜・表面物理分科会他	nakatuka@alice.xtal.nagoya-u.ac.jp http://www.edit-ws.jp/	定員 200名
26	第24回高専シンポジウム in Oyama(小山高専)	高専シンポジウム協議会他	TEL 0285-20-2141 senkou@oyama-ct.ac.jp	
28～29	第161回塑性加工工学講座「圧延加工の基礎と応用」(東京電機大)	日本塑性加工学会	http://www.jstp.or.jp	定員 70名
28～29	LMPシンポジウム2019「レーザ加工技術の基礎・応用と最新動向」(名古屋)	日本溶接協会	TEL 03-5823-6324 mizuho_shimozono@jwes.or.jp http://www-it.jwes.or.jp/	1.21 定員 100名
29	第4回日本機械学会イノベーション講演会(東京)	日本機械学会	TEL 03-5360-3506 junpei.sasurai@mae.nagoya-u.ac.jp http://ijsme.org/2019/	
29～30	金属学会セミナー(特別講座)転位を知る—金属・合金における強度・延性の担い手—(東工大)(本号58頁)	日本金属学会	TEL 022-223-3685 FAX 022-223-6312 meeting@jim.or.jp https://jim.or.jp/	1.10
29～30	Mate2019第25回「エレクトロニクスにおけるマイクロ接合・実装技術」シンポジウム(横浜)	スマートプロセス学会他	TEL 06-6878-5628 mate@sps-mste.jp http://sps-mste.jp/mate/	
30～31	第26回超音波による非破壊評価シンポジウム(東京)	日本非破壊検査協会(東京)	TEL 03-5609-4015 nakamura@jsndi.or.jp	

開催日	名称・開催地・掲載号	主催	問合せ先	締切
<b>2019年2月</b>				
1	第17回ナノテクノロジー総合シンポジウム(JAPAN NANO 2019)(東京)	物材機構ナノテクノロジープラットフォームフォーラムセンター	JAPANNANO@nims.go.jp TEL 029-859-2777 https://nanonet.go.jp/japannano/2019/	
1	第332回塑性加工シンポジウム「部材軽量化に寄与するホットスタンピング技術」(同志社大)	日本塑性加工学会	http://www.jstj.or.jp	定員 80名
1	第34回軽金属セミナー「アルミニウム合金の組織—応用編(加工・熱処理による組織変化)」(第5回)(工学院大学)	軽金属学会	TEL 03-3538-0232 http://www.jilm.or.jp/	定員 40名
8	第3回講演会「自動車塗装から、塗装のこれからを語る。」(東京)	日本塗装技術協会	TEL 03-6228-1711 tosou-jimukyoku@jcot.gr.jp http://jcot.gr.jp	
8	第110回シンポジウム「資源循環の世界潮流と最新動向および軽金属分野の課題と展望」(日大)	軽金属学会	TEL 03-3538-0232 http://www.jilm.or.jp/	定員 100名
18	第78回塑性加工技術フォーラム 板材・バルク材の破断限界予測に向けた取り組みの現状(名工大)	日本塑性加工学会	http://www.jstj.or.jp	定員 80名
22	理研シンポジウム第21回「トライボコーティングの現状と将来」(和光)	理化学研究所大森素形材工学研究室, トライボコーティング技術研究会	TEL 03-5918-7613 tribo@tribocoati.st https://www.sites.google.com/site/tribocoating/	定員 200名
22	第400回講習会「次世代の内燃機関を支える精密加工技術」(東理大)	精密工学会	TEL 03-5226-5191 jspe_koushu@jspe.or.jp http://www.jspe.or.jp/	定員 80名
22	第34回塗料・塗装研究発表会(東大生産技研)	日本塗装技術協会	TEL 03-66228-1711 tosou-jimukyoku@jcot.gr.jp http://jcot.gr.jp	
27	ウィンタースクール「トポロジー最適化の基礎～積層造形によるモノづくりへの応用～」(東京理科大)	日本計算工学会	TEL 03-3868-8957 office@jsces.org http://www.jsces.org/	2.18
<b>2019年3月</b>				
1	第44回組織検査用試料の作り方(組織の現出)講習会「鉄鋼材料・非鉄金属材料・表面改質処理および異常組織材」(千葉工大)	材料技術教育研究会	TEL 047-431-7451	2.25
6～8	第10回日本複合材料会議(JCCM-10)(東京)	日本材料学会, 日本複合材料学会	TEL 03-5981-6011 jscm@asas-mail.jp http://www.jscm.gr.jp	
8	レアメタル研究会(東大生産技研)(本号59頁)	レアメタル研究会	TEL 03-5452-6314 tmiya@iis.u-tokyo.ac.jp http://www.okabe.iis.u-tokyo.ac.jp/japanese/index_j.html	
12～13	2018年度量子ビームサイエンスフェスタ(第10回MLFシンポジウム/第36回PFシンポジウム合同開催)(つくば)	KEK物質構造科学研究所, J-PARCセンター他	qbs-festa-office@pfiqst.kek.jp http://qbs-festa.kek.jp/2018/	
18～19	第22回 磁粉・浸透・目視部門・電磁気応用部門・漏れ試験部門合同シンポジウム「表面探傷技術による健全性診断, 品質検査」(東北大)	日本非破壊検査協会	TEL 03-5609-4015 nakamura@jsndi.or.jp http://www.jsndi.jp/	参加 3.4
20～22	日本金属学会春期講演大会 東京電機大学東京千住キャンパス(東京)(本号51頁)	日本金属学会	TEL 022-223-3685 FAX 022-223-6312 annualm@jim.or.jp https://jim.or.jp/	講演 1.8 参加 2.15
22	日本金属学会 春期講演大会併催企業説明会(東京電機大)(本号53頁)	日本金属学会	TEL 022-223-3685 FAX 022-223-6312 jim.company2019@jim.or.jp https://data.jim.or.jp/jim/kigyuu/	3.8
<b>2019年5月</b>				
10～13	軽金属学会第136回春期大会(富山)	軽金属学会	TEL 03-3538-0232 shomu@jilm.or.jp http://www.jilm.or.jp/	参加予約 4.4
15～16	第35回希土類討論会(吹田)	日本希土類学会(阪大内)	TEL 06-6879-7352 kidorui@chem.eng.osaka-u.ac.jp http://www.kidorui.org	発表 1.18
<b>2019年6月</b>				
2～7	世界水素技術会議2019(東京)	水素エネルギー協会	TEL 029-861-8712 org@whct2019.jp http://whct2019.jp	
7～9	2019年度塑性加工春季講演会(同志社大)	日本塑性加工学会	http://www.jstj.or.jp	
14～15	第6回 最先端の顕微鏡と理論計算に関する国際シンポジウム(名古屋)	ファインセラミックスセンター	TEL 052-581-3241 amtc6@intergroup.co.jp http://amtc6.com	
<b>2019年7月</b>				
1～5	第3回アジア赤外線サーモグラフィコンファレンス(QIRT-Asia2019)(東京)	日本非破壊検査協会(東京)	TEL 03-5609-4011 sec@qirtasia2019.com	
<b>2019年8月</b>				
18～22	国際会議(PRICM-10)(中国西安)(8号405頁)	中国金属学会	pricm10@csm.org.cn http://www.pricm10.com/	概要 1.31 論文 3.1

開催日	名称・開催地・掲載号	主催	問合せ先	締切
<b>2019年9月</b>				
11～13	日本金属学会秋期講演大会(岡山大学津島キャンパス)(津島)	日本金属学会	TEL 022-223-3685 FAX 022-223-6312 annualm@jim.or.jp	
<b>2019年10月</b>				
27～11.1	The 13th Pacific Rim Conference of Ceramic Societies(PACRIM13)(沖縄)	日本セラミックス協会	TEL 03-3362-5231 jim-ask@cersj.org http://www.ceramic.or.jp/pacrim13/	
<b>2019年11月</b>				
25～27	EcoDesign 2019国際会議(横浜)	エコデザイン学会連合会	ecodesign2019_secretariat@ecodenet.com http://ecodenet.com/ed2019/	
17～22	国際ガスタービン会議2019Tokyo(IGTC2019 Tokyo)(東京)	日本ガスタービン学会	http://www.gtsj.org/english	
<b>2020年3月</b>				
8～11	COMPSAFE2020(第3回安心・安全・環境に関する計算理工学国際会議)(神戸)	COMPSAFE2020実行委員会	secretary@compsafe2020.org http://www.compsafe2020.org	

## ◆ 新 入 会 員 ◆

(2018年10月20日～2018年11月20日)

### 正 員

藤原 稔 DOWA サーモテック株式会社	大羽 久雄 株式会社大阪アサヒメタル工場	高田 裕治 国立研究開発法人物質・材料研究機構
不破 大樹 YKK株式会社	石川 義幸 大成建設株式会社	猿 楽 峻 三菱電機株式会社
須 齋 京太 古河電気工業株式会社	小 飼 貴史 イーグル工業株式会社	

### 学 生 員

菅野 陽平 長岡技術科学大学	上野 恭司 茨城大学	川手 直樹 富山大学
渡邊 将人 茨城大学	中田 晴子 富山大学	



会報編集委員会より：本年より巻頭記事にて「金属素描」「金属なんでもランキング」企画が始まります。毎号お楽しみにして下さい。

### 2017, 2018年度会報編集委員会 (五十音順, 敬称略)

委 員 長 副 委 員 長 委 員	山本剛久 大塚 誠 赤瀬善太郎 上田恭介 木口賢紀 佐々木秀顕 芹澤 愛 田中康弘 寺西 亮 中島孝一 本間智之 森戸春彦 李 海文	足立 望 梅津理恵 北村一浩 佐藤紘一 高木成幸 田辺栄司 寺本武司 仲村龍介 水本将之 諸岡 聡 和田 武	安達正芳 榎木勝徳 高坂典晃 佐藤幸生 竹田 修 趙 研 土井康太郎 野山義裕 宮崎秀俊 山中謙太	池尾直子 大野直子 近藤亮太 下島康嗣 武田雅敏 佃 諭志 永井 崇 萩沢武仁 宮澤知孝 横山賢一	池田賢一 大森俊洋 齊藤敬高 杉浦夏子 田中智仁 堤 祐介 長岡 亨 長谷川 誠 森田敏之 吉矢真人	石本卓也 小幡亜希子 榊 浩司 杉田一樹 田中秀明 寺井智之 中川鉄水 春本高志 盛田元彰 吉年規治
-------------------------	--	--	--	--	---	---

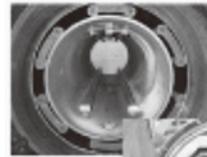
まてりあ 第58巻 第1号 (2019) 発行日 2019年1月1日 定価(本体1,700円+税)送料120円  
年間機関購読料金52,400円(税・送料込)

発行所 公益社団法人日本金属学会 〒980-8544 仙台市青葉区一番町一丁目14-32 TEL 022-223-3685 FAX 022-223-6312	発行人 山村英明 印刷所 小宮山印刷工業株式会社 発売所 丸善雄松堂株式会社 〒160-0002 東京都新宿区四谷坂町 10-10
--	--

# 高温真空 3000℃への挑戦

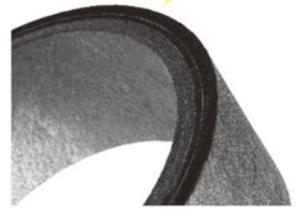
URL:<http://www.mechanical-carbon.co.jp/>

- 高純度カーボングラファイト部品(純度5ppm以下)
- C/C(カーボン・カーボン)材による精密加工
- カーボン成形断熱材、カーボンフェルト
- MGR回転式脱ガス装置用ローター
- 高温真空炉 炉内メンテナンス
- メカニカルシール、パッキン等の摺動部品修理・改造

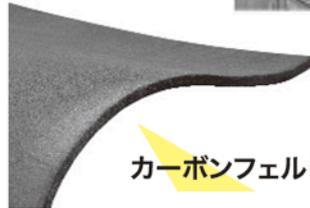


炉の改修

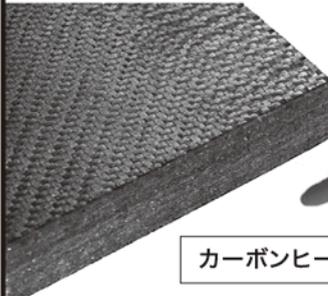
ハイブリット成形断熱材



高断熱+省エネ



カーボンフェルト



6面シート  
貼り

カーボンヒーター、カーボン断熱材、高温真空炉内治具、消耗品等のご相談はスペシャリストにお任せください。



## メカニカルカーボン工業株式会社

本社:247-0061 神奈川県鎌倉市台5-3-25 TEL.0467-45-0101 FAX.0467-43-1680  
工場:新潟工場・本社工場・野村工場(愛媛)・広見工場(愛媛) 事業所:郡山・東京・大阪・松山・周南・福岡  
お問い合わせEメール [mck@mechanical-carbon.co.jp](mailto:mck@mechanical-carbon.co.jp)

**EAG**  
LABORATORIES

各種表面分析受託サービスなら  
ナノサイエンス株式会社(EAGの日本支社)にお任せください。

GDMS分析  
世界シェア **No.1**



高感度不純物分析手法 GDMS ICPとは異なり固体のまま最小限の試料処理で直接分析ができます。

測定対象試料

高純度金属	合金・超合金	特殊金属	レアメタル・レアアース
カーボン及び黒鉛製造品	酸化物・炭化物・窒化物・硫化物などのセラミックス	各種半導体材料	太陽電池用シリコン

“世界の分析リーダー”の技術を日本で——



ナノサイエンス株式会社

〒171-0021 東京都豊島区西池袋1-21-7 住友不動産池袋西口ビル7F  
TEL.03-5396-0531(代) FAX.03-5396-1930 [E-mail] [analysis@eag.com](mailto:analysis@eag.com)

お問い合わせ・見積り・分析お申込みはHPから… <http://www.nanoscience.co.jp>

## 分子／結晶模型モデル (組み立て用キット)

プラスチックの原子と結合を使った教育学習用の分子／結晶構造の模型です。原子は色で区別され、正しい角度に設定された分枝を持ち、決められた長さの結合長で繋ぎ合わされます。直径1cmと6mmの原子を使う2種類のモデルサイズがあります。

### 基本セット

■Basic Structure (1cmモデル) Class Set ¥10,000.-

硫酸、塩化ナトリウム、ダイヤモンド、グラファイト、金属、酸と塩基、洗剤、ナイロン、アモルファス構造の学習用(原子515個)

■Lattice (1cmモデル) Class Set ¥10,500.-

ダイヤモンド、グラファイト、塩化ナトリウム、8および12配位金属、塩化セシウム、セ閃亜鉛鉱、ウルツ鉱、ルチル、氷構造の学習用(原子380個)

■Organic and Inorganic Chemistry

(1cmモデル) Class Set ¥8,800.-

アルカン、アルケン、アルキン、環構造、酸素／窒素／硫黄／リンの官能基、ベンゼン環、ポリマー、複素結晶の学習用(原子500個)



### 結晶セット

■Carbon Nanotube

(原子150個) ¥3,100.-

■Diamond (原子450個) ¥7,000.-

■Beta-Quartz (原子1,400個) ¥13,600.-

■Mica (原子1,550個) ¥25,200.- その他、多数あり

(製作 : Cochranes of Oxford Ltd.)

化学プロセス用の物性データベース

## DIPPR with DIADEM pro (Design Institute for Physical Property Data)

価格(税別) ¥350,000.- (一般向け) ¥60,000.- (教育機関向け)

2,280化合物についての49種類の熱物性値(実測値)、複数の推算式、原文献データと15種類の温度依存物性には推算式の係数などのデータベースです。AIChE推奨のインターフェイスソフトウェア(DIADEM)付きのスタンドアロンシステムです。

おもな機能(DIADEM)

■検索対象 : Name, Formula, CAS番号、物性データ

■物性値 : 実測値、推算式による予測値

■データ表示 : テーブルとグラフプロット

■複数化合物データの重ね合わせプロット

■MDL Chimeプラグインによる構造式の立体表示

■ユーザーデータベースの作成



システムプラットフォーム :  
Windows Xp/Vista/7/8 (AIChE DIPPR Project 801)

25,000件のセラミックス状態図データベース

## ACerS-NIST

Phase Equilibria Diagrams, Version 4.2

価格(税別) ¥160,000.- マルチユーザー ¥260,000.-

検索条件

■成分系、元素記号

■著者、出典誌名、出版年

■状態図番号

データ表示

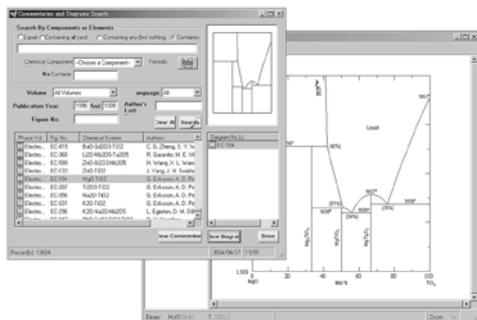
◆モル百分率 ↔ 重量百分率

◆Lever rule計算

◆ズームアップ/ズームダウン

データソース / 新データ2,500件を追加

●Phase Diagrams for Ceramists (Volumes I - III, Annual Volumes '91, '92 and '93, High Tc Superconductor monographs (two), Phas Diagrams for Zirconium + Zirconia Systems and Phase Diagrams for Electronic Ceramics Vol.15)



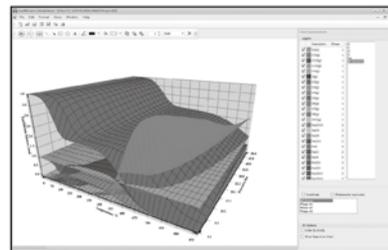
システムプラットフォーム : Windows XP/Vista/7

化学反応／平衡計算ソフトウェア

## HSC Chemistry for Windows, Ver.9.7

価格(税別) ¥650,000.- / ¥280,000.- (一般 / 教育)

約28,000種についてのエンタルピー、エントロピー、熱容量のデータベースを基に化学反応の計算やGIBBSまたはSOLGASMIXのルーチンによる化学平衡を計算します。反応、熱平衡、分子量計算などの一般的なモジュールの他、電気化学セル平衡と相安定性、腐食の研究に使われるEh-pH(プールバ)状態図の作成などユニークなモジュールを持ち合わせています。計算結果のテーブルと状態図はクリップボードにコピーできます。SIM Flowsheetモジュールもあり、複数のユニットプロセスからなるプロセス全体のシミュレーションとモデリングができます。



システムプラットフォーム : Windows 7/8/10  
(Autototec Research Oy. 製作)

# 株式会社 デジタルデータマネジメント

東京都中央区日本橋茅場町1-11-8 紅萌ビル 〒103-0025  
TEL.03-5641-1771 FAX.03-5641-1772 <http://www.ddmcorp.com>