



Title	合金の状態図とコンピューター
Author(s)	有働, 公一
Citation	センターレポート, 6, pp.6-7; 1985
Issue Date	1985-12
URL	<a href="http://hdl.handle.net/10069/25307">http://hdl.handle.net/10069/25307</a>
Right	

This document is downloaded at: 2020-10-27T21:42:31Z

歯学部

有 働 公 一

金属材料は、特殊な場合を除いて純金属では使用されず、数種類の金属からなる合金として使用されています。それは、合金のほうが、機械的、化学的性質が優れていることが多いからです。これらの性質は、合金を構成する元素自身の持つ性質のみならず、合金の結晶学的状態によっても左右されます。合金の結晶構造は、組成、温度、圧力によって変化しますが、これを一目でわかるようにしたのが状態図と言われるものです。状態図は、金属材料を設計するうえで、最も重要な情報のひとつであるといえます。状態図に関する著名な研究者のひとりであるD. de Fontaineは次のような事を言っています。

"A material scientist attempting to determine optimal compositions and optimal thermal and mechanical processing of a given alloy system for the purpose of maximizing properties without knowledge of the phase diagram is like a tourist attempting to get most out of a foreign city without consulting the map."

状態図を決定する最も確実な方法は、ある合金系において、組成の異なる多数の試料を作製し、一つ一つX線回折装置や透過型電子顕微鏡を使って調べていく方法です。しかし、この方法は非常に時間を要します。合金元素が三種類とか、四種類とかになると気の遠くなるような時間がかかります。もし合金の状態図が計算によって決定することができれば、実験的に決定するよりもはるかに少ない時間ですみますし、少ない実験データより多くの情報を得ることができます。さらに、計算式に近似の次数が高いものを使えば、通常は実験が困難な低温や高温の状態も、測定可能な温度範囲の状態を外挿することによって知ることができます。

私達が用いている計算方法はクラスタ変分法といわれる方法で、統計熱力学的に導出された方法です。これは他の方法に比べて計算式の物理的意味が明確である、エントロピー項の計算が正確であるという特徴があります。この方法を用いて、任意の組成、温度で種々の結晶構造をとった場合の自由エネルギーを求めれば、それらを比較して最も自由エネルギーが低い結晶構造が安定であることとなります。自由エネルギーを計算する過程では逐次近似法を用います。一般によく知られている逐次近似法はNewton-Rapson法ですが、この方法は収束は速いのですが、初期値の選び方によっては、求める値に収束しないという欠点があります。クラスタ変分法では数十個の変数がありますので、この欠点は致命的です。Newton-Rapson法の欠点をなくした逐次近似法に、自然逐次近似法(Natural Iteration Method)があります。この方法は、初

期値の選び方には鈍感で、必ず求める値に収束しますが、収束が遅いという欠点があります。収束するまでの繰り返し数が時には1万数千回に及ぶことがあります。こうなると大型計算機に頼らざるを得なくなります。マイクロコンピュータをつかっても計算できない事はありませんがコンパイラ型の言語を使っても数時間もかかってしまうため実用になりません。

現在はマイクロコンピュータを大型計算機のインテリジェントターミナルとして使用しています。時間のかかる逐次計算だけを大型で計算し、他はすべてマイクロコンピュータ側で処理しています。こういった使い方をするうえで、センターレポート第4号に掲載されたインテリジェントターミナル用プログラムは非常に便利で、使い易いプログラムだと思います。このプログラムを作製され、プログラムのコピーを快諾して下さった工学部の金丸邦康先生にこの場を借りて感謝いたします。

#### 教養部における情報処理教育について

教養部

寺 崎 康 博

今年度から装いも新たに教養部において情報処理教育を開始した。当教養部では10年以上も前から総合科目の一つとして情報科学の名のもとに情報に関する基礎的な講義を開設し、成果をあげてきた。今回担当講師の交代を機に、「コンピュータによる情報処理に関する様々な問題の考察」を中心テーマに置き、講義名も情報処理として始めることにした。内容をこのようにしたのはもちろん理由がなければいけない。まずその第一は高度情報社会と形容される社会環境である。そして、第二にはこの科目の専任スタッフを持たない教養部としては担当講師のカバーできる範囲が限定されるということがある。

まず、最初の理由については講義の開設主旨とも関連するので少し述べておくことにする。新聞、テレビ、雑誌、あるいは書籍を通じて高度情報社会に関する記事を見ない日はないほどの情報洪水である。実際、その背後では生産現場や金融機関、あるいは事務所でのコンピュータの高度な利用や、ネットワークの形成が我々の想像以上に進んでいる。また、地域社会にとってこのような中でどう対応したらよいのかを研究、あるいは実験を重ねている現状がある。そのための予算も様々な形で確保されている。さらに、ワープロ、パソコンが家庭にまで普及し始めている。どちらかという現実の方がリードしていて我々はやや振り回され気味といえよう。