

日本語 AI 書庫版

新素材設計とロケット推進 工学のための人工知能

AIポテンシャル、自律実験室、
物理情報機械学習（PIML）の
融合

金京鎮弁護士

kimkj.com • AI書庫 • 2026

新素材設計とロケット推進工学のための人工知能

AIポテンシャル、自律実験室、物理情報機械学習（PIML）の融合

金京鎮弁護士

原子1つの動きを学習する機械学習ポテンシャルから始まり、求める性質をあらかじめ定めて結晶構造を逆生成する生成モデル、ロボットが自ら実験を繰り返す自律実験室、ロケットの高温部を守るハイエントロピー合金とセラミックス複合材、金属3Dプリンティングの欠陥監視と疲労寿命保証、物理法則を損失関数に組み込んで燃焼を計算する物理情報機械学習、冷却流路設計と液体ロケットエンジンのリアルタイム診断および強化学習制御まで、全10章にまとめた。科学技術に関心のある一般読者のために数式を使わず分かりやすく解説し、各章に確認された根拠資料を添え、2つの人工知能レビュアーによる指導教授スタイルの批判を反映した改訂修正版である。

公開研究資料アーカイブ

本書は人工知能によって整理・制作された。世界中の主要言語で作成された資料を収集・総合したものである。NotebookLMは資料がどの言語で書かれているかに関わらず、質問の言語を制限しない。読者は本書の準備に使用された同一の研究資料アーカイブに対し、自身の言語で質問することができる。一部の資料が韓国語、英語、その他の言語で書かれていても同様である。NotebookLMで設定を開き、出力言語を希望の言語に指定すれば、回答と生成結果がその言語で出力される。

本書の準備に使用した公開NotebookLMアーカイブ(AI for Materials Science and Rocket Engine Engineering, 資料129件): <https://notebook.google.com/notebook/ac39e3ce-77a9-4e78-9aaf-b52c45c2934d>

本書の韓国語原版はkimkj.com AI書齋にある: <https://kimkj.com/ai-library/?mod=document&uid=12453>

目次

各章のタイトルをクリックすると該当する本文に移動する。最初から読む場合は第1章を選択する。

第1章 マテリアルズインフォマティクスの基礎と機械学習原子間ポテンシャル (MLIP)

第2章 生成AIと拡散モデル (Diffusion Models) 基盤の結晶構造予測 (CSP) および材料逆設計

第3章 自律実験室と科学的マルチエージェントシステム

第4章 ハイエントロピー合金 (HEA) および超合金の物理一貫性予測と組成最適化

第5章 航空宇宙用複合材料 (CMC) および超高温セラミックス (UHTC) の微細構造制御と加熱寿命評価

第6章 金属積層造形 (LPBF/DED) プロセスの熱応力モデリングおよびインシトゥ (In-situ) 欠陥認識

第7章 3Dプリンティングされた航空宇宙合金の後加工および高サイクル疲労寿命保証

第8章 物理情報機械学習 (PIML/PINNs) と演算子学習 (FNO) を通じた気体反応流動および燃焼化学モデリング

第9章 再生冷却流路、フィルム冷却孔およびインデュースのトポロジー逆設計最適化

第10章 液体ロケットエンジン (LRE) のリアルタイム欠陥診断、デジタルツインおよび強化学習に基づく推進リアルタイム適応制御

第1章 マテリアルズインフォマティクスの基礎と機械学習原子間ポテンシャル（MLIP）

はじめに

私たちが使うすべての物は素材で作られている。スプーンは鉄で作られ、コップはガラスで作られる。ロケットエンジンのノズルも特別な金属やセラミックスで作られる。素材が変われば、物の性質も変わる。

素材の性質は、目に見えない小さな粒から始まる。その粒が原子である。原子は物質を構成する基本単位である。原子がどのように結びつき、どのように動くかによって、鉄が硬くなったり軟らかくなったりする。

ロケットを作る人は、この原子の動きをあらかじめ知りたいと考える。ロケットエンジンの内部は温度が数千度まで上昇する。圧力も非常に高い。このような環境で金属が溶けずに耐えられるかを事前に知る必要がある。実際の部品を作って試験すると、多大な費用と時間がかかる。そのため、科学者はコンピュータの中で原子を動かしてみる。これが原子シミュレーションである。

コンピュータで原子を動かすには規則が必要である。原子の一つひとつがどの方向にどれだけの力を受けるかを知る必要があるためだ。この規則を正確に作る方法と高速に作る方法は、長らく互いに異なっていた。正確な方法は遅く、高速な方法は不正確であった。この二つの間の壁を崩す新たな道が、機械学習原子間ポテンシャル（Machine Learning Interatomic Potentials, MLIP）である。以降ではこの技術をMLIPと呼ぶ。

本章では、MLIPとは何か、どのように発展してきたのかを順を追って解説する。まず原子計算の二つの古い手法を取り上げる。次に、機械学習がどのようにその間をつないだのかを見る。初期の手法から最新の手法まで順番にたどる。最後に、この技術をロケット素材や新素材の研究に用いる際に何に注意すべきかを整理する。数式は使わない。イメージが浮かぶ平易な言葉で説明する。

マテリアルズインフォマティクスという言葉もここで初めて登場する。この言葉は素材情報学を意味する。素材に関する膨大なデータを集め、コンピュータで分析して新素材を探索する学問である。MLIPはその中で原子レベルの計算を担う中核的なツールである。

なぜこの話がロケットにつながるのかをあらかじめ明らかにしておく。ロケット開発は、新素材の探索と切り離すことが難しい。より軽く、より高温に耐える金属があれば、ロケットの性能は向上する。そのような素材を実験室で一つひとつ作って試験しては、何年もかかってしまう。コンピュータの中で原子計算によって候補をあらかじめ絞り込めば、この時間を短縮できる。MLIPはその計算を高速かつ正確にする鍵である。本章を読み終えれば、新素材がコンピュータの中でどのように生み出されるのか、その全体像を理解できるようになる。

1. 序論と背景：密度汎関数理論（DFT）と機械学習の結合

本節で扱うこと

原子をコンピュータで扱うには、原子間のエネルギーと力を知る必要がある。この値を求める方法は大きく分けて二つあった。一つは電子の動きまで計算する正確な方法である。もう一つは、あらかじめ定めた簡潔な公式で素早く求める方法である。本節では、これら二つの方法がそれぞれ何を得意とし、何を苦手としているかを説明する。

そして、二つの方法の間に横たわる長年の課題を取り上げる。正確な方法はあまりにも遅く、高速な方法は頻繁に誤る。この問題を解決するために機械学習が登場した。本節では、まずその全体像を描き出す。

本節のいくつかの用語は、後でも繰り返し使われる。エネルギー、力、ポテンシャルエネルギー曲面がそれである。今これらの意味を把握しておけば、次の節の理解が容易になる。難しい数式はない。頭の中にイメージが描ける言葉だけで解き明かしていく。

原子を扱う計算において中核となる二つの値は、エネルギーと力である。エネルギーは、原子の配列がどれほど安定しているかを示す。エネルギーが低いほど、その配列は安定した状態にある。力は、各原子がどの方向に押されるかを示す。力が分かれば、原子が次の瞬間にどこへ動くかを計算できる。

エネルギーと力は、実際には別個に存在する値ではない。力は、エネルギーが位置によってどれほど急激に変化するから生じる。エネルギーを土地の高低差に例えるなら、力はその斜面の傾きである。ボールは斜面が急な方へと転がり落ちる。原子もエネルギーが低くなる方向へと押される。そのため、エネルギーマップが分かれば、力はそのマップの傾きとして得られる。この関係は後で再び重要になる。

密度汎関数理論（Density Functional Theory, DFT）は、電子の分布を計算してエネルギーと力を求める手法である。以降ではDFTと呼ぶ。電子は原子の周りを回る極めて小さな電荷の粒である。電子がどこにどれだけ集まっているかが化学結合を決定する。DFTはこの電子分布を量子力学の原理によって計算する。量子力学は極微の世界の物理法則である。そのため、DFTは化学結合を正確に描き出す。

DFTが出力する値も完全な真理ではない。DFTは電子間の反発や引き合いを近似式で扱う。この近似式をどう選択するかによって、結果がわずかに異なってくる。そのため、DFTの値は真値というよりも、決められた設定の下で得られた基準値である。機械学習はこの基準値を学習する。後でDFTを正解と呼ぶ際にも、このような意味として理解しておく必要がある。

問題は速度である。DFTは原子数が増えるにつれて計算量が急速に増大する。原子が2倍になれば、計算時間は2倍をはるかに超えて増加する。大型スーパーコンピュータを用いても、扱える原子数は通常数百個レベルにとどまる。計算できる時間スケールもごくわずかな瞬間にすぎない。ロケット素材のように大きな塊を長時間観察する用途には適していない。

その対極にあるのが経験的力場（Empirical Force Field）である。この手法は、原子間の力をあらかじめ定めた簡潔な公式によって求める。電子を一つひとつ計算することはない。その代わりに、原子間距離などのいくつかの値だけで力を決定する。計算負荷が軽いため、数百万個の原子を扱うことも可能である。観察できる時間スケールもはるかに長い。

経験的力場は高速である反面、弱点も抱えている。固定された結合を仮定した力場は、結合が切断され新たに生成される瞬間をうまく描写できない。後に登場した反応性力場や金属用の力場は、狭い範囲であれば結合の変化や欠陥をある程度扱うことができる。それでも、幅広い条件下で精度を維持することは困難である。原子が配置を大きく変える相転移の再現も容易ではない。ロケットエンジンのような過酷な高温環境では、こうした現象が頻繁に起こる。そのため、単純な力場だけでは誤差が大きくなってしまう。

ここで、二つの手法の違いを日常生活に例えてみることができる。DFTは、1人の生徒の宿題を入念に採点する作業に似ている。正確ではあるが、全校生徒の宿題を採点しようとすれば長い時間がかかる。経験的力場は、答えだけを素早く見渡して合っているかを確認する作業に似ている。高速ではあるが、難問ではミスが生じる。科学者は長年にわたり、正確さと速度のどちらか一方を選ばざるを得なかった。

機械学習原子間ポテンシャルは、この二者択一の壁を打ち破る試みである。ポテンシャルとは、原子配列ごとにエネルギーがいくらであるかを知らせる地図のようなものである。この地図をポテンシャルエネルギー曲面と呼ぶ。MLIPは、DFTが計算した基準値を機械学習によって学習する。機械学習は、多数の例から規則性を自ら見つけ出す計算手法である。十分な例を学習すれば、未知の原子配列のエネルギーと力を高速に予測できる。

MLIPがどのように学習するのかをもう少し詳しく説明する。まずDFTを用いて、多様な原子配列のエネルギーと力を計算する。この計算結果は、解答が書かれた問題集のようなものである。機械学習モデルはこの問題集を見ながら規則を習得する。どのような配列がなぜそのようなエネルギーを持つのかを自ら把握していく。訓練が完了すれば、問題集に載っていなかった新たな配列に対しても素早く解を導き出す。

この手法の目標は明白である。DFTと同等に正確でありながら、経験的力場のように高速な計算を実現することだ。この目標が達成されれば、ロケット材料をコンピュータの中で大規模かつ長時間にわたって試験できる

ようになる。高温下で金属がどのように振動するのか、亀裂がどのように伝播するのかを原子単位で観察できる。実機試験の前に候補となる素材を絞り込むことが可能になる。本章の残りの部分では、この目標を達成するためのさまざまな技術について述べる。

あらかじめ断っておくべき点がある。MLIPはDFTを完全に代替するものではない。DFTが生成した基準値があって初めて学習できるからである。二つの手法は競合するのではなく、対をなす関係にある。DFTが基準値を作り出し、MLIPはその値を高速に展開する。この協調によって、大規模な計算が可能となる。

2. 古典的記述子に基づく機械学習モデル

本節で扱うこと

機械学習によって原子エネルギーを学習するには、まず原子の周囲の幾何構造を数値に変換しなければならない。コンピュータは図形ではなく数値を扱うからである。この数値のリストを記述子 (Descriptor) と呼ぶ。本節では、初期のMLIPが採用した三つの記述子方式について見ていく。

これら三つの方式は、それぞれ特徴が異なる。一つはニューラルネットワークを用い、もう一つは二つの環境の類似度を比較し、さらに別の一つはディープラーニングによって記述子そのものまで学習する。三つはいずれも優れた成果を収めたが、同時に限界も露呈した。その限界が次世代の技術と呼び寄せることになる。

優れた記述子には守るべき規則がある。同一の物質は常に同一の数値で表現されなければならないという規則である。机の向きを変えて置いても机は机である。原子構造も丸ごと回転させたり平行移動させたりすれば位置は変わる。それでも物質そのものは変わらない。記述子はこのような変化に対して不変でなければならない。この性質を不変性 (Invariance) と呼ぶ。

不変性を維持できなければ問題が生じる。モデルが同一の物質を複数の異なる物質であると誤認してしまう。そうなれば、同一の対象を何度も別々に学習しなければならない。学習は遅くなり、予測は不安定になる。初期のMLIP研究は、この不変性を記述子の中に手作業で組み込むことに注力した。

2.1 原子ごとにエネルギーを分割して学習するニューラルネットワーク (BPNN)

ベエラーとパリネロは2007年に一つの重要な着想を提示した。全エネルギーを原子ごとのエネルギーの総和に分割しようという着想である。この方式を原子エネルギー分解と呼ぶ。各原子は自身の周囲のみを参照して微小なエネルギー値を出力する。すべての原子の値を合計すると、構造全体のエネルギーとなる。このニューラルネットワークをベエラー・パリネロ・ニューラルネットワーク (Behler-Parrinello Neural Network, BPNN) と呼ぶ。

ニューラルネットワークは、人間の脳細胞の結合を模して構築された計算構造である。入力を受け取り、多段階の処理を経て解を出力する。多数の例を用いて訓練することで、入力と出力の間の規則性を学習する。BPNNは原子の周囲の形状を入力として受け取り、その原子のエネルギーを出力として算出する。

このとき、原子の周囲環境を数値に変換するツールが原子中心対称性関数 (Atom-Centered Symmetry Functions, ACSF) である。この関数はある原子を中心に据える。そして一定の距離内にある近傍の原子を走査する。近傍原子までの距離やそれらが形成する角度を数値として保持する。距離のみを保持する部分と、角度まで保持する部分に分かれる。このようにして生成された数値は、構造を回転させたり平行移動させたりしても変化しない。

この手法はロケット素材の研究においても意義がある。金属が高温になると、原子はその位置で激しく振動する。近傍原子までの距離や角度が絶え間なく変化する。ACSFはこうした変化を数値として捉え切る。そのため、温度変化に伴う素材の挙動を学習するための第一歩となった。

しかし、明確な限界も存在した。元素の種類が増えると、必要となる数値の数が急激に増大する。ロケット用合金では多数の元素を混合することが多い。元素が5種類あれば、元素ペアの組み合わせが膨大になる。角度を扱う3原子の組み合わせはさらに爆発的に増加する。このように種類が増えるほど計算負荷が跳ね上がる問題を

「次元の呪い」と呼ぶ。

もう一つの限界は、記述子を人間が手作業で設計しなければならない点である。どの距離や角度をどれほど細かく取り入れるかを人間が決定する。この選択を誤ると、重要な情報を見落とすことになる。優れた記述子を作成すること自体が困難な課題であった。この負担を軽減しようとする取り組みが、その後の手法へとつながっていった。

それでも、この手法が残した意義は大きい。全エネルギーを原子ごとに分割するという発想は、現在も受け継がれている。最新のモデルの多くもこの分解原理に従っている。各原子が周囲のみを参照して値を算出し、最後にすべてを足し合わせる方式である。この方式のおかげで、原子数が多くても計算を分割して処理することができる。ベエラーとパリネロの着想は、MLIPの礎となった。

2.2 二つの環境の類似度を測るポテンシャル（GAP）

バルトークとチャーニらは2010年に別の道を選択した。ニューラルネットワークの代わりに、二つの環境がどれほど似ているかを直接比較する方式である。この手法をガウス近似ポテンシャル（Gaussian Approximation Potential, GAP）と呼ぶ。未知の原子環境に遭遇すると、すでに学習済みの環境群と比較する。類似した環境が多ければ、そのエネルギーを参照して解を算出する。

この比較の中核となる道具が原子位置平滑化重複（Smooth Overlap of Atomic Positions, SOAP）である。SOAPは原子の周囲を硬い点ではなく滑らかな雲として描く。隣接する原子ごとにぼやけた球を一つずつ置くようなものだ。二つの原子環境の雲が多く重なれば似た環境とみなす。この方式は回転に対しても影響を受けないように設計されている。

滑らかな雲として描くのには理由がある。原子は常に少しずつ揺れている。位置を硬い点としてのみ見ると、わずかな揺れでも値が大きく跳ね上がる。雲として描けば小さな揺れは滑らかにやり過ごせる。そのためSOAPは結晶中の欠陥や秩序のない材料を扱うことに長けていた。

ガウス近似ポテンシャルは少ないデータでも高い精度を発揮した。この点はDFT計算が高コストである状況で大きな助けとなる。結晶欠陥、液体状態、秩序のない非晶質材料の研究に多く用いられた。ロケット材料においても欠陥と無秩序は重要なテーマである。そのため、この方法は長く引用される基準となった。

限界はデータが大きくなるときに現れる。この方法は新しい環境を学習済みのすべての環境と比較する。学習データが増えるほど比較する対象が増える。そうなるに計算と保存にかかる負担がともに増大する。現在のよう数十万件を超える大規模データを扱うには計算量が多すぎる。

そのため、この方法は大規模な問題において他の構造に座を譲った。大規模データから素早く学習するにはディープラーニングニューラルネットワークのほうが適していた。ディープラーニングはデータが多いほど威力を発揮する方法だからである。ただし、ガウス近似ポテンシャルが打ち立てた精度の基準は今もなお生きている。新しいモデルの性能を測る際の比較対象として頻繁に用いられている。

SOAPが残した思想も受け継がれている。原子の周囲を滑らかな密度として捉える発想である。この発想は後発の多様なモデルへと浸透した。硬い点の代わりに滑らかな分布として扱えば計算が安定する。小さな揺れで値が跳ね上がらないからである。ロケット材料のように原子が大きく揺れる高温の計算において、この安定性は役立つ。

2.3 記述子まで自ら学習するディープラーニング（DeePMD）

ZhangとCarらは2018年にディープラーニングを原子計算に本格的に導入した。この方法を深層ポテンシャル分子動力学（Deep Potential Molecular Dynamics, DeePMD）と呼ぶ。分子動力学は原子の動きを時間とともに追跡するシミュレーションである。DeePMDはこのシミュレーションに用いる力をディープラーニングで計算する。

先行する方法は人間が記述子を設計していた。DeePMDはこの負担を大幅に軽減した。原子周囲の座標をニューラルネットワークが自ら適切な形態へと変換する。人間が距離や角度を一つひとつ選ぶ必要がない。それでいながら、回転や平行移動に影響されない性質を保った。

ディープラーニングという言葉についてもここで少し補足しておく。ディープラーニングは多層に積み重ねたニューラルネットワークを意味する。層を深く積み重ねると複雑な規則も学習できる。浅いニューラルネットワークは単純な規則しか学習できない。深いニューラルネットワークは原子間の複雑に絡み合った関係まで捉える。その代わり、学習には多くのデータと計算が必要となる。「ディープ (Deep)」という言葉は層が深いという意味に由来する。

この方法の強みは大規模性である。ディープラーニングは原子が多くても計算の負担がそれほど大きく増えない。そのためDeePMDは数百万個の原子の動きも扱うことができる。水、金属、半導体といった多様な材料に用いられた。大規模な系を長時間観察する場面で力を発揮した。

DeePMDはロケット材料の研究においても意義がある。高温で金属の塊がどのように変化するかを見るには、多くの原子を扱うなければならない。小さな断片だけを見ては全体の挙動を見落としてしまう。DeePMDは大きな塊を扱うことができるため、このような研究に適していた。

それでも、初期の記述子方式全体が抱えていた限界は残されていた。これらの方式は、定められた距離内の近傍のみを個別に観察する。遠くにある原子の影響を取り込むには観察距離を広げなければならない。そうすると近傍の数が大幅に増え、計算の負担が重くなる。長距離の相互作用を取り込むことが構造上困難であった。

DeePMDが開いたもう一つの扉は、大規模計算ツールとの結合である。この方法は大型スーパーコンピュータで数十億個の原子を扱う研究へとつながった。複数の元素を混ぜ合わせた合金を大規模に計算する用途にも用いられている。ロケット用高温合金の研究は、まさにこうした大規模計算を必要とする。小さな断片だけでは見落としてしまう挙動を、大きな系であれば捉えることができるからである。

この限界が新たな発想を呼び起こした。原子一つだけを中心において周囲を見る方式を乗り越えようという考えである。原子同士が互いに情報をやり取りできるようにしてはどうだろうか。情報を何度もやり取りすれば、遠くの原子の影響も順次伝達される。この発想が次節のグラフニューラルネットワークへとつながっていく。

3. 最新の同変 (Equivariant) グラフニューラルネットワーク (GNN)

本節では、昨今MLIPの主流となった手法を扱う。グラフニューラルネットワーク (Graph Neural Network, GNN) である。この手法は原子を点とみなし、原子間の近傍関係を線とみなす。ここでの線は化学結合そのものではない。一定の距離内にある近傍をつないだという意味である。この線は計算の途中で変化することもある。地下鉄路線図が駅を点で、駅同士の接続を線で描くのと似ている。点と線に沿って情報をやり取りしながらエネルギーを計算する。

本節のキーワードは同変性 (Equivariance) である。前節の不変性と対をなす性質だ。まず同変性とは何か、なぜ原子計算に必要なのかを説明する。次に、この性質を取り入れた代表的なモデルを初期から最新のものまで順に見ていく。最後に、広範なデータを事前学習した大規模モデルまでを扱う。

グラフニューラルネットワークは情報をやり取りする方式で計算を行う。各原子は自身の近傍にメッセージを送る。近傍から届いたメッセージを集めて自身の状態を更新する。このプロセスを何度も繰り返す。1回やり取りすればすぐ隣の原子がわかる。2回やり取りすれば近傍のその先の近傍までわかる。繰り返すほど、より遠くの原子の影響が次々と伝わってくる。この方式をメッセージパッシング (Message Passing) と呼ぶ。

この構造は前節の限界をある程度解消する。観察距離を無理に広げる必要がない。メッセージを何度もやり取りすれば、近傍の向こう側の情報が伝わってくるからである。ただし、層数が決まっていれば情報が届く範囲も限定される。極めて遠距離の静電気や分散力といった効果は、この方式単独ではすべて捉えきれない。そうした効果は別途作成した長距離項として加える必要がある。それでもグラフニューラルネットワークは、広範

囲の相互作用を効率的に取り込む大きな前進であった。

3.1 回転しても反転しても成り立つ対称性

原子の世界には保たれる対称性が存在する。構造を丸ごと平行移動したり回転させたりしても、物理法則は変わらない。平行移動、回転、反転をすべて集めたものを $E(3)$ と呼ぶ。このうち回転のみを集めたものを $SO(3)$ と呼ぶ。名称は難解に見えるが意味は単純である。平行移動、回転、鏡のような反転の集まりである。回転と反転は互いに異なる動きだ。回転は形をそのまま回し、反転は左右が入れ替わった鏡像を作り出す。

前述の不変性は、このような動きに対しても値が変わらない性質である。エネルギーは不変量だ。構造を回転させても、その構造のエネルギーは同一でなければならない。しかし、すべての値が不変というわけではない。力は向きを持つ値である。構造を回転させれば、力の向きも一緒に回転しなければならない。

まさにこの性質が同変性である。同変性は、入力回転すれば出力も同様の方式で回転する性質を指す。力は同変量である。構造を右に回転させれば、各原子にかかる力も右に回転する。不変性と同変性をともに満たしてこそ、原子計算が物理法則と合致する。

不変量と同変量を1文で区別しておく。回転しても値がそのままであれば不変量である。回転すれば値も一緒に回転するものが同変量である。エネルギーは向きのない1つの数値であるため不変量だ。温度や密度といった値も向きを持たないため不変量である。力や速度のように向きを持つ値は同変量である。モデルはそれぞれの値がどちらに属するかを理解して扱わなければならない。

ここで、前節で保留にしていた話をつなげる。力はエネルギーマップの勾配であると述べた。優れたモデルは力を個別に当て推量で予測したりはしない。まずエネルギーを求め、そのエネルギーマップの勾配から力を得る。この順序を守るのには理由がある。力を勝手に出力してしまうと、エネルギーが保存されない力が出てくる恐れがある。そのような力で長時間計算を続けると、本来存在しないエネルギーが勝手に生じたり消失したりする。そうするとシミュレーションが少しずつ膨張したり破綻したりする。エネルギーから勾配として力を求めれば、こうした不整合は生じない。物理学では、このようにエネルギーから導かれる力を保存力と呼ぶ。

これら二つの性質を最初からモデルに組み込んでおけば、大きな利点がある。モデルが同一の物質を様々な方向から個別に学習する必要がなくなる。一度学習した規則があらゆる方向に自動的に適用される。そのため、少量のデータでも安定して学習できる。DFT計算が高コストである分、このデータの節約は大きな強みとなる。

ロケット材料においては方向が重要となる事象が多い。亀裂は特定の方向へと広がる。結晶面に沿って滑る変形も方向性を持つ。酸化反応も表面の方位によって異なって起こる。力の方向を正確に扱えなければ、こうした事象を誤って描写してしまう。同変性を保つモデルはこの点で有利である。

この対称性をもう少し分かりやすい例えに置き換えてみる。同じおもちゃのブロック構造を写真で何枚も撮影するとしてしよう。正面から撮った写真と横から撮った写真は異なって見える。それでもブロック構造そのものは同一である。人間はこの事実をすぐに理解できる。しかしコンピュータにとっては二枚の写真が異なる入力となる。対称性を組み込んでいないモデルは、二枚の写真を異なる物質とみなす可能性がある。対称性を組み込んだモデルは、二枚の写真を同じ物質とみなす。この差が学習の効率を大きく分ける。

要するに、対称性は装飾ではなく骨格である。対称性を保つモデルはデータを節約し、予測を安定させる。対称性を損なうモデルは物理的に不合理な解を出力する可能性がある。そのため、最新のMLIP研究はこの性質をいかにうまく組み込むかに集中している。

3.2 距離のみを見ていた方式から方向までやり取りする方式へ

SchNetは2018年に登場した初期のグラフニューラルネットワークである。このモデルは原子間の距離のみをメッセージとしてやり取りする。距離は向きを持たない値である。そのためSchNetは不変情報のみを扱う不変グラフニューラルネットワークである。構造がシンプルで計算が高速である。

距離のみを用いる方式には弱点がある。方向が重要となる結合を直接捉えることが難しい。同じ距離であっても角度が異なれば結合は異なる。この違いを見落とすと誤差が生じる。DimeNetはこの点を補完し、原子間の角度までメッセージに含めた。方向情報を取り込もうとする取り組みが続いたのである。

BatznerとKozinskyらは2022年に大きな一歩を踏み出した。NequIPというモデルである。このモデルは距離や角度を超えて、方向そのものをメッセージとしてやり取りする。方向を持つ値をそのまま伝達し混合する。これが同変メッセージパッシングである。力の方向と原子周囲の3次元形状をはるかに忠実に捉える。

NequIPの大きな利点はデータ効率である。方向情報を原理に忠実に取り込むため、少ない事例でも良好に学習する。公開された論文では、従来モデルよりはるかに少ない学習データで高い精度を達成したと明らかにされている。DFT計算が1件ごとに高コストである研究において、この節約は実質的な利益をもたらす。

データ効率がなぜ重要であるかを再度確認しておく。DFT計算1件には膨大な計算機時間がかかる。学習に数万件が必要となれば計算コストは大幅に膨れ上がる。NequIPははるかに少ない件数でも同等の精度を発揮する。そうすれば同じ予算でより難度の高い材料を扱うことができる。ロケット用新素材はデータが乏しい場合が多い。データ効率の高いモデルはこのような状況で極めて有用である。

この進歩はロケット材料の計算において直ちに意義を持つ。亀裂、欠陥、相転移はいずれも方向と密接に絡み合っている。同変モデルは、こうした方向性を持つ事象をより正確に描写する。少量のDFTデータでも極限環境における挙動を学習できる。そのためNequIP以降、同変方式はこの分野の標準に近い位置づけとなった。

NequIPと同時期に、効率を高めようとする研究も相次いだ。方向情報を扱いながらも計算を軽量化しようとする試みである。最近のある研究では、効率を高めた同変モデルを発表し、2025年の学術誌に掲載された。精度を保ちながら計算負荷を軽減する方向性である。こうした取り組みが積み重なることで、同変方式は実際の研究で実用的なものとなった。

ただし代償がある。方向情報を原理どおりに組み合わせるには、負荷の大きい数学演算が必要となる。この演算をテンソル積と呼ぶ。正確である反面、計算量とメモリの負荷が大きい。この負荷が後で再び問題として浮上する。この話は第5節へと続いていく。

3.3 複数の原子の関係を一度に捉える方法（MACE）

バタティアとチャーニらは2022年にMACEを発表した。このモデルは同変グラフニューラルネットワークに多体展開という古くからの物理理論を組み合わせた。多体とは複数の原子が共に作り出す効果を意味する。材料内部では原子1対1の関係だけが重要なわけではない。3個、4個の原子が共に成す配置も性質を変える。

従来のグラフニューラルネットワークは、このような多体効果を取り込むためにメッセージを何度もやり取りしていた。やり取りの回数が増えると計算負荷が増大し、学習が遅くなる。MACEは別の道を見出した。一度集めた近傍情報を互いに掛け合わせ、複数の原子の効果を一度に作り出す。そのため、少ない回数のメッセージ伝達だけで4原子以上の効果まで取り込むことができる。

この設計の利点は、精度と速度を両立させる点にある。メッセージ伝達を少なくすれば計算が軽くなる。それでいながら多体効果を見落とさず、精度を維持する。大きな結晶や長時間の分子動力学において、この長所はさらに際立つ。そのため、MACEは多くの研究で強力な基準モデルとして用いられている。

MACEはロケット用材料の研究にも用いられている。最近、ある研究チームはアルミニウム、チタン、クロム、モリブデン、タングステンを混合したハイエントロピー合金を扱った。この合金は複数の元素をほぼ同等の割合で混ぜ合わせた材料である。研究チームはMACEを用いてこの合金の原子間ポテンシャルを構築した。そして温度による相安定性を調べた。この研究は2026年に物理学の学術誌に掲載された。高温用合金の設計にMACEが活用された事例である。ただし、この研究が示したのは相安定性の計算である。実際の部品の亀裂や寿命までをこの単一の研究で検証したわけではない。

限界も併せて見ておく。MACEも方向情報を組み合わせる際にテンソル積を用いる。そのため、角運動量という方向の精度を高めると、計算負荷が急速に増大する。非常に大きな系や極めて長時間のシミュレーションで

は、この負荷が依然として問題となる。この点を軽減しようとする研究が後述される。

多体効果をわかりやすい例に置き換えてみる。教室で2人の生徒だけを見れば、仲が良いかどうかだけがわかる。3人の生徒が集まると雰囲気が変わる。4人の生徒が集まれば、また別の流れが生まれる。原子も同様である。2つの原子の関係だけでは材料の性質をすべて捉えることはできない。複数の原子が共に作り出す配置が性質を変化させる。MACEは、この複数原子の関係を少ないステップで捉え切る。

もう1つの課題は、学習した範囲外の状況である。MACEがいくら正確であっても、学習データになかった未知の配列では誤る可能性がある。ロケットの環境は常に極限状態であり、未知の事象が多い。そのため、高精度なモデルであるほど、自身が把握できていない瞬間を自ら知らせる仕組みが必要となる。その仕組みが第4節の能動学習である。

3.4 幅広い材料をあらかじめ学習した大規模モデル（CHGNet、MatterSim）

これまでのモデルは、通常1種類の材料や狭い範囲を対象にして訓練される。新しい材料を扱う際には、それに応じたデータで再訓練しなければならない。この負担を軽減しようとする潮流がファウンデーションポテンシャルである。ファウンデーションポテンシャルは、極めて広範な材料データをあらかじめ学習した大規模モデルである。多彩な料理を幅広く習得した料理人が、新しい食材にも難なく対応できるのと似ている。

CHGNetは2023年に登場した代表的なファウンデーションポテンシャルである。このモデルはマテリアルズ・プロジェクト（Materials Project）という大規模な計算データベースを用いて訓練された。マテリアルズ・プロジェクトは、数多くの材料のDFT計算結果を集めた公開データである。CHGNetはこれに加えて電荷や磁気状態の手がかりも共に学習する。そのため、バッテリー材料におけるリチウムの移動や遷移金属酸化物の相変化を的確に追跡できる。

CHGNetが電荷と磁気状態を学習するのには理由がある。バッテリー材料ではリチウムが出入りし、電荷のやり取りが行われる。遷移金属酸化物では原子の磁気状態が性質を変化させる。こうした変化を見落とすと、材料の挙動を誤って描写してしまう。CHGNetはこの手がかりを原子環境の表現に共に盛り込み、より広範な材料を包括する。ただし、電荷を保存則に従う値として細かく追跡する電気化学モデルではない。学習した表現によって磁気状態の手がかりを取り込む程度と理解するのが適切である。ロケット用材料にも酸化物や遷移金属が頻繁に用いられるため、この能力が役立つ。

MatterSimは2024年に公開されたもう1つのファウンデーションポテンシャルである。このモデルは極めて広い温度と圧力の範囲をターゲットにしている。公開論文では、0ケルビンから5000ケルビンまで、0ギガパスカルから1000ギガパスカルまでをカバーすると明記されている。ケルビンは絶対温度の単位であり、ギガパスカルは圧力の単位である。この範囲内にはロケットエンジンの高温高压の条件も含まれる。ただし、学習範囲が重なっていることと、実際に正確に予測できることは別の話である。1000ギガパスカルはロケット燃焼室の圧力よりもはるかに高い値である。燃焼ガスや酸化表面といったロケット固有の状況は個別に検証しなければならない。そのため、このモデルは極限材料研究の出発点として注目を集めている。公開論文は、このモデルが多くのデータを節約したと述べている。広範な条件をあらかじめ学習したおかげで、未知の材料にも迅速に対応できる。

最近では、精度と速度を共に引き上げた新たなファウンデーションポテンシャルも登場した。GRACEと呼ばれるモデルである。このモデルはグラフ原子クラスター展開という枠組みで構築された。研究チームは屈指の大規模材料データの一部を用いてこのモデルを訓練した。公開された研究では、このモデルが精度と効率の新たなバランスラインを確立したと報告されている。この研究は2026年に材料計算の学術誌に掲載された。大規模モデルを適切に調整すれば、精度を維持しながら特定の課題に適應させられることを示した。

ファウンデーションポテンシャルは研究手法を変えつつある。従来は材料ごとに最初からモデルを構築していた。現在は大規模モデルをまず適用し、必要な部分だけを微調整する。このようにわずかに修正して活用する手法をファインチューニング（微調整）と呼ぶ。新しい合金を扱う際にも、少ないデータで迅速に対応できる。

こうした大規模モデルを公正に比較・評価しようとする取り組みも活発になっている。多様なファウンデーションポテンシャルが登場したことで、どれが優れているかの判断が難しくなった。そのため、同一の条件で性能を測定する公開評価の場が誕生した。複数の研究チームが構築したベンチマークプラットフォームがそれである。こうした場では精度、速度、安定性を総合的に比較する。利用者は自らの課題に適したモデルを選択できる。

それでも注意すべき点はある。ファウンデーションポテンシャルがあらゆる状況で自動的に的中するわけではない。学習データに少なかった合金や表面反応では誤差が大きくなる可能性がある。したがって、優れたモデルであるほど検証を並行して行う必要がある。未知の構造はDFTで再計算して確認しなければならない。この確認手順が次節のテーマである。

4. 能動学習（Active Learning）ループと誤差および不確実性評価

いくら優れたモデルであっても、学習していない状況では誤る可能性がある。問題は、モデルが誤っていないながらも自信を持って回答を出力してしまう場合である。それでは人間が誤差に気づくのが難しい。本節では、モデルが自身の把握できていない瞬間を自ら知らせるようにする方法を扱う。

その方法が能動学習（Active Learning）である。能動学習とは、モデルが確信の持てない構造を選び出し、改めて正確に計算し直す反復的な手順である。この循環がどのように機能するのか、自信のなさをどのように数値化して測定するのかを見ていく。ロケット材料のような極限かつ未知の環境において、この手順がなぜ安全装置となるのかについても触れる。

内挿と外挿を日常生活の例に置き換えてみる。過去数年間の気温がわかっていれば、今日の気温を見当づけることができる。すでに経験した範囲内において推定する行為が内挿である。しかし、これまでにない猛暑が訪れると見当は外れる。経験していない範囲へと踏み出す行為が外挿である。モデルも同様に、経験した範囲内では的確に予測できるが、その外側では揺らぎが生じる。

モデルが安全に予測できるのは、学習データの内側である。この領域を内挿領域と呼ぶ。学習データに囲まれた内側では予測の信頼性が高い。しかし、その外側に出ると事情は異なる。この外側を外挿領域と呼ぶ。外挿領域では、モデルがもっともらしく見えながらも誤った答えを出すことがある。

外挿領域における誤差は極めて危険である。シミュレーションの最中に原子同士が重なり合ったり、構造が異常に崩壊したりすることがある。このような事態が静かに進行すると、結果全体を信用できなくなる。ロケットの環境は常に過酷であり、外挿が頻繁に生じる。高温、激しい衝突、酸化、亀裂などは学習データにおいて稀な事象だからである。そのため、この瞬間を捉える仕組みが不可欠となる。

能動学習ループは4つのステップを踏む。まず、小規模なDFTデータでモデルを訓練する。次に、そのモデルを用いて原子の運動を高速に計算する。計算の過程でモデルが確信の持てない構造が現れた場合、印を付けておく。その構造だけを選び出し、DFTで正確に再計算する。新たな結果をデータに追加し、モデルを更新する。このステップを繰り返すことで、モデルは次第に広範な状況を学習していく。未知の道において分岐点ごとに地図を再確認する作業に似ている。

このループの核心は、自信のなさを数値として測定することである。この数値を不確実性（Uncertainty）と呼ぶ。不確実性を測定する方法はいくつか存在する。続く小節で代表的な手法を見ていく。

4.1 モデルが把握できていない瞬間を数値で測る（UQ）

不確実性を測定する第1の方法は、外挿度を用いることである。モーメントテンソルポテンシャル（Moment Tensor Potential、MTP）と呼ばれるモデルがこの手法を採用している。このモデルは、現在の原子配列が学習データとどの程度異なっているかを数値として測定する。この数値を外挿度と呼ぶ。外挿度が低ければ既知の配列であり、予測は安全である。外挿度が高ければ未知の配列であるため、再計算を行わなければならない。

第2の方法は、複数のモデルによる予測結果を比較照合することである。同一のデータを用いて少しずつ異なる条件で訓練した複数のモデルを作成する。このモデル群をアンサンブルと呼ぶ。新たな構造に対してこれらのモデルの答えが概ね一致していれば、大筋で信頼できる。答えが大きく分かれた場合、その構造は危険信号である。ただし、同一データで学習したモデル同士は、未知の入力に対して揃って誤る可能性もある。したがって、アンサンブルの一致は参考指標にすぎず、完全な保証ではない。複数の人に同じ質問を投げかけて回答が割れた場合、それは難問であると判断するのと同様である。

第3の方法は、モデル自身に誤差の範囲を出力させることである。最近の研究はこの方向性で進展を見せている。ある研究チームは証拠に基づくディープラーニング（エビデンシャル・ディープラーニング）と呼ばれる手法を原子間ポテンシャルに組み込んだ。この手法は、予測値とともにその値をどの程度信頼できるかという指標も併せて出力する。複数のモデルを個別に実行する必要がないため、計算負荷が軽い。この研究は2025年に学術誌に掲載された。

不確実性を能動学習により深く組み込もうとする研究も進められている。ある手法では、シミュレーションが自律的に不確実性の高い領域を探索するように設計されている。モデルが確信を持ってない配列の方向へと原子の運動を誘導する。そうすることで、新たに学習する価値の高い構造をより迅速に収集できる。未知の状況を効率的に補完していく手法である。

この手順は、ロケット材料研究において安全性を担保する骨格となる。極限環境では予期せぬ配列が常に現れる。不確実性の評価機構がなければ、誤った結果を真実であると信じ込んでしまう危険がある。不確実性の評価機構が存在すれば、危険な瞬間に計算を停止して検証を行うことができる。それだけ結果の信頼性を高めることができる。

不確実性を扱う手法は、現在も新たなものが登場し続けている。最近では、モデルの設計自体に不備がある場合まで考慮した研究も存在する。モデルの基本前提から誤っていれば、算出される不確実性も誤ったものになる。この問題を指摘した研究が2025年に学術誌に掲載された。不確実性を測定することがそれほどまでに困難であることを物語っている。それでも、この方向への進展が極限材料計算の安全性を支えている。

この反復手順のもう1つの利点は、データを節約できることである。DFT計算はコストが高い。そのため、手当たり次第に構造を計算しては無駄が大きくなる。能動学習は学習する価値の高い構造だけを選定して計算する。同じ予算でより有用なデータを集めることができる。その分、優れたモデルをより迅速に得ることができる。

この手法は試験勉強に例えることができる。解き方を知っている問題を解き直すのは時間の無駄である。間違えた問題だけを選んで解けば、実力は早く伸びる。能動学習もまた、モデルの苦手な部分だけを抽出して補完する。少ない計算量で大きな成果を得る手法である。ロケット材料研究は計算予算が常に逼迫している。だからこそ、この効率化が実際の開発において大きな力となる。

ただし、不確実性を正確に測定すること自体が難しい課題である。ある方法は計算負荷が大きく、ある方法は精度が劣る。モデルがそもそも誤って設計されていれば、不確実性さえも誤って算出される恐れがある。最近でもこの問題を扱う研究が続いている。不確実性の定量化はまだ完成した技術ではなく、発展途上の分野である。

5. テンソル積を省く幾何学的ニューラルネットワーク：演算効率と曲線の滑らかさ

同変モデルは正確であるものの、計算量が多いという負担を抱えている。その負担の大きな原因が、前述したテンソル積である。本節では、テンソル積がなぜ大きな負担となるのか、これを削減または排除しようとする最新の研究にはどのようなものがあるのかを扱う。

ここでさらにもう一つ重要なのが、曲線の滑らかさである。原子計算の結果はエネルギー地図であるポテンシャルエネルギー曲面である。この曲面がでこぼこしていると力の計算値が跳ね、シミュレーションが破綻する。本節では、新しい手法が速度と滑らかさを両立させようとする過程を説明する。

テンソル積は、方向を持つ値を原理通りに掛け合わせる数学演算である。同変モデルはこの演算によって方向情報を正確に扱う。問題は、方向の精度を高めるほどこの演算の負荷が急速に増大する点である。計算時間とメモリ使用量がともに膨らむ。大規模な系や長時間のシミュレーションでは、この負担が障壁となる。

テンソル積をもう少し平易な言葉で説明してみる。方向を持つ情報を組み合わせる際には厳密な規則が存在する。二つの方向の値を単純に足したり掛けたりしてはならない。物理法則に従ってペアを作り、組み合わせる必要がある。テンソル積はこの複雑な組み合わせを正確に行ってくれる。正確である反面、ペアの数は方向の精度に応じて急速に増加する。そのため、精度を少し上げるだけでも計算負荷が大きくなる。

この障壁を乗り越えようとする研究がさまざまな方向から現れている。一つの方法性は、テンソル積をより高速に計算する特別なプログラムを開発することである。最近のある研究は、このような方法で分子動力学計算を大幅に高速化した。この研究は2026年に学術誌に掲載された。テンソル積自体は残しつつ、計算を最適化する道である。

5.1 テンソル積を一切用いない新たな設計

もう一つの方法性は、テンソル積を一切用いないことである。Geoditeと呼ばれる研究がこの道を選んだ。この研究の表題は「テンソル積を用いない同変原子間ポテンシャル」である。方向を組み合わせる負荷の大きい演算を別の方法で代替する。それでいて回転対称性を原理通りに維持する。

この手法がテンソル積を代替する原理を簡単に確認しておく。負荷の大きい組み合わせ演算の代わりに局所座標系を設定する。各原子の周囲に基準となる方向の枠組みを構築するのである。この枠組みの上で情報を扱えば、方向を軽量の計算で維持できる。対称性はそのまま保ちながら負担のみを軽減する。

この研究が示した成果は二つある。一つは速度である。公開された要旨では、同等精度のモデルと比べて3倍から5倍高速であると述べている。もう一つは精度の幅広さである。材料の安定性予測、熱伝導、格子振動、ナノ秒スケールの分子動力学において、先行モデルに匹敵する精度を達成した。速度を大幅に向上させながら精度を維持した形である。この研究は査読を経ていない初期研究である。そのため、確立された標準ではなく有望な候補技術として位置づけられる。

テンソル積を排除すると、速度が向上するだけではない。曲線の滑らかさにも役立つ。テンソル積において方向の精度を切り詰めると、曲面に微細な波模様が生じる恐れがある。この波は力の計算値を跳ねさせる。テンソル積を用いない設計は、このような波を回避するように作られている。結合が生成および切断される区間でも曲線が滑らかである。

この滑らかさは、ロケット材料の計算において極めて重要である。高温下では原子が激しく振動し、結合が頻繁に切断される。曲線が粗いと、このような区間で力が跳ねてシミュレーションが破綻する。滑らかな曲線は極限条件でも計算を安定させる。したがって、滑らかさは精度と同等に重要な特性である。

同様の目標を持つ別の研究も存在する。ある研究では、方向情報を球面格子上に展開した後、軽量のニューラルネットワークで統合する。この手法もテンソル積より高速でありながら表現力を維持する。カットオフ距離を状況に応じて滑らかに変化させる研究も登場している。これらの研究はいずれも初期研究段階にある。複数のチームが同一の目標に向かって異なるアプローチを試行している。

なぜ滑らかさがこれほど重要なのかをもう少し詳しく見てみる。力はエネルギー曲面の傾きから導出される。曲面が滑らかであれば傾きも滑らかに変化する。曲面に微細な波模様があると傾きが突然跳ね上がる。跳ねた力は原子を予期せぬ方向へ押しやり、シミュレーションを台無しにする。そのため、正確なエネルギーと同じくらい滑らかな曲面が必要とされる。見かけ上の誤差が小さくても、曲面が粗ければ長時間の計算において問題が深刻化する。

この潮流の意義は明白である。同変モデルの精度を維持しながら、計算の負担を軽減しようということである。計算が軽量化されれば、より大規模な系をより長期間にわたって観察できる。ロケット部品のような大規模な材料を長期間観察する作業に直結して役立つ。ただし、まだ実証データが蓄積されている途上であるため、

検証結果を併せて見守る必要がある。

6. 電子密度モデリングと軽量機器運用のための構造的ブルーニング

大規模なモデルは正確であるものの負荷が大きく、大規模な計算機器を必要とする。本節では、大規模モデルを軽量化しながら物理法則を遵守する手法を扱う。二つの考え方を考察する。一つは、重要度の低い計算経路を削減するブルーニングである。もう一つは、電子の分布に関する手がかりをモデルに組み込む手法である。本節の核心は、軽量化を図りつつも無作為に削減しないことにある。原子計算には遵守すべき物理特性が数多く存在する。対称性、力の方向、エネルギーと力の一貫性がそれである。これらの特性を保ちながらモデルを縮小する手法を説明する。

ブルーニング (Pruning) は、ニューラルネットワークにおいて重要度の低い経路を削減する手法である。ニューラルネットワーク内で情報を伝達する経路をチャンネルと呼ぶ。すべてのチャンネルが同等に重要であるわけではない。使用頻度の低いチャンネルを削減すれば計算が軽量化される。鞆からあまり使わない荷物を取り出せば鞆が軽くなるのと同じである。

問題は、無作為にチャンネルを削減すると物理法則が損なわれる点である。同変モデルにおいてチャンネルは方向と密接に結びついている。同一の方向グループに属するチャンネルをばらばらに削減すると、力の方向が不自然になる。ここで一つの誤解を正しておく。モデルがまずエネルギーを出力し、力をその勾配として求める場合、チャンネルを削減してもエネルギーと力の関係性自体はそのまま維持される。ブルーニングが直ちにこの関係を破綻させるわけではない。代わりに、方向を扱う精度や予測精度が低下する恐れがある。そのため、ブルーニングは慎重に行わなければならない。

6.1 物理的一貫性を維持する構造的ブルーニング

構造的ブルーニング (Structured Pruning) は、チャンネルを方向グループ単位で削減する手法である。一つずつばらばらに削減するのではなく、グループごと扱う。そうしてこそ方向のバランスが崩れない。スカラーチャンネルとベクトルチャンネルの比率も維持されるよう管理する。スカラーは方向を持たない値であり、ベクトルは方向を持つ値である。この比率を守ってこそ、対称性と力の方向が完全に保たれる。

なぜグループ単位で削減すべきなのかをイメージとして描いてみる。方位磁針の針は東西南北を揃って指し示してこそ意味を持つ。南北のみを残して東西を切り落とせば、方向が歪んでしまう。同変モデルの方向チャンネルもこれと同様である。一つのグループ内の値は揃って存在してこそ方向を正しく指し示す。その一部のみをばらばらに削減すれば、力の方向がずれてしまう。したがって、削減する際は必ずグループを単位とする。

どのチャンネルを削減するかは重要度によって判断する。各チャンネルが結果にどれほど寄与しているかを測定する。寄与度の小さいチャンネルから削減していく。この際も方向グループを単位とする。一つのグループ内の値を総合的に見て判断する。このようにすれば、情報を伝達する骨格を維持しながら無駄な部分のみを削ぎ落とすことができる。

最近、ある研究陣がこの手法をファウンデーションポテンシャルに適用した。この研究の表題は「構造的ブルーニングによって作られたコンパクトなSO(3)同変原子モデル」である。公開された要旨では、パラメータを数分の一に削減したと述べている。パラメータとはモデルが学習する値の数である。事前学習に要する計算量も数分の一に減少した。それでいてファインチューニング後にはエネルギーと力の誤差がむしろ減少したと報告している。この研究は2026年に公開された初期研究である。査読を経ていないため、確定した結果とはみなされない。

この研究が目指した目標は、軽量の機器でも高精度な計算を実行することである。大規模なモデルは通常、複数台の高性能機器を必要とする。モデルを適切に縮小できれば、より小規模な機器でも同等の計算が可能となる。研究への参入障壁が下がれば、より多くの研究者が材料計算に参加できるようになる。ただし、どのような機器まで対応可能であるかは今後さらに確認する必要がある。

ロケット材料の研究においても、この方向性は有意義である。極限環境を長期間シミュレーションするには、計算を何度も反復しなければならない。モデルが軽量であれば、同一の機器でより多くの実験を実行できる。候補材料を迅速に選別するのに役立つ。精度を保ちながら速度を確保することが核心である。

ブルーニングと同様の目標を持つ別の手法も存在する。大規模モデルの知識を小規模モデルに移転する手法である。この手法を知識蒸留と呼ぶ。十分に学習した大規模モデルが小規模モデルの教師となる。小規模モデルは教師の回答を模倣しながら学習する。そうすることで、小さな規模でありながら大規模モデルに近い性能を発揮する。ブルーニングと知識蒸留は、いずれも大規模モデルを軽量に移植するアプローチである。

注意すべき点は、物理的検証を怠らないことである。ブルーニングによって得られた軽量モデルも必ず確認しなければならない。エネルギーと力の一貫性、力の方向、対称性、不確実性の表示を併せて点検する。これらの性質が守られてこそ、軽量モデルであっても信頼することができる。高速であるだけのモデルは、極限計算において危険である。

6.2 電子密度の手がかりを付加する手法

モデルを縮小すると、表現力も同時に低下する危険がある。この損失を補うための一つのアイデアが、電子密度を組み込むことである。電子密度とは、電子が空間にどれほど広がっているかを示す地図である。元来DFTが扱う基本的な物理量である。この手がかりをモデル内部に直接組み込み、不足した表現力を補おうという発想である。このように異なる情報を組み合わせる手法をハイブリッドと呼ぶ。

ここで結合の種類について簡単に触れておく。イオン結合は電子を授受して引き合う結合である。食塩がこのような結合で成り立っている。金属結合は電子が多数の原子間を自由に流れる結合である。この結合のおかげで鉄は電気をよく通す。共有結合は電子を互いに共有し合う結合である。このように結合ごとに電子の分布形態が異なる。

電子密度情報は、結合の種類の判別に役立つ。材料内部の結合にはさまざまな種類が存在する。イオン結合、金属結合、共有結合は互いに異なる。電子がどこにどれほど集まっているかを見れば、この違いを把握できる。この手がかりをモデルに組み込めば、結合の性質をよりの確に捉えることができる。

この手法は、遠方まで及ぶ効果を再現する上でも有用であると見なされる。電子の影響は近接した隣接原子を越えて遠方にも及ぶ。モデルを軽量に縮小すると、このような長距離効果を見落としやすい。電子密度の手がかりを適切に活用すれば、この遠方の影響をある程度反映できるという期待がある。ただし、電子密度を組み込むからといって長距離の静電気力や分散力が自動的に解決されるわけではない。どのような密度をどのような方式で組み込み、どのように検証するかについては、現在も研究が蓄積されている段階である。したがって、この方向性は確定した解法というよりは一つの提案として理解するのが適切である。

ロケット材料には、結合の種類が複雑に混在している場合が多い。金属とセラミックスが併用され、酸化被膜が形成される。このような材料を扱うには、結合の性質を正確に判別しなければならない。電子密度を組み込む手法はこの判別を支援し、極限材料の計算に寄与することができる。

大規模計算の可能性も同時に切り拓かれる。最近、ある研究陣が複数元素を混合した合金を原子100万個規模でシミュレーションした。多成分系を扱う原子間ポテンシャルを用いて大規模な系を扱った。この研究は2026年に公開された初期研究である。ハイエントロピー合金はロケット用高温材料の重要な候補である。大規模な系を扱うほど、実際の部品に近い挙動を観察することができる。

本節の内容をロケット開発の現実に照らし合わせてみる。ロケット企業や研究所の中には、計算資源が潤沢でないところも多い。大規模モデルを複数台の機器でしか実行できないとすれば、参入障壁が高い。モデルが軽量化されれば、より多くのチームが原子計算に着手できるようになる。候補材料を迅速に選別して実際の試験対象を絞り込む。計算と実験を行き来するこの好循環が、開発期間を短縮する。

本節における二つの考え方は同一の目標に向かっている。精度を維持しながら計算を軽量化することである。ブルーニングは無駄を削ぎ落とし、電子密度の手がかりは不足した表現力を補う。双方を併用すれば、小型の

機器でも実用的なモデルを構築できる。この方向性は現在も発展途上であり、検証が積み重ねられている段階である。

まとめ

本章は原子をコンピュータで扱う規則についての物語であった。この規則が原子間ポテンシャルである。古くから科学者は正確な方法と高速な方法の間でどちらかを選ばなければならなかった。DFTは正確だが遅く、経験的力場は高速だが不正確であった。機械学習原子間ポテンシャル（MLIP）は、この二つの間の壁を取り払うための道具である。

この歩みを簡潔に振り返る。初めは人間が原子の周囲を数値に変換した。次にはモデルがその数値を自ら学習した。その次には原子同士で情報をやり取りするようにした。今では幅広い材料をあらかじめ学習した大規模モデルまで登場した。一步進むごとに人間の手を減らし、データの力を高めた。この流れがMLIP発展の大きな幹である。

初期のMLIPは、原子周囲の形状を人間が設計した数値へと変換した。この記述方式にはBPNN、ガウス近似ポテンシャル、DeePMDがあった。これらは大きな成果を上げたが、限界も露呈した。元素が増えると計算負荷が大きくなり、長距離効果を取り込むことが難しかった。

次世代が等変グラフニューラルネットワークである。この手法は原子を点、隣接関係を線と見なして情報をやり取りする。回転と並進に適合する対称性をモデル内に組み込み、データを節約した。SchNetからNequIP、MACEへと続き、精度と効率がともに向上した。CHGNetやMatterSim、GRACEのようなファウンデーションポテンシャルは、幅広い材料をあらかじめ学習した大規模モデルとして定着した。

正確なモデルにも弱点はある。学習していない未知の状況では誤る可能性がある。そのため、モデルが把握できていない瞬間を自ら知らせる能動学習と不確実性の定量化が必要となる。ロケットの環境は常に極限であり、未知の事象が多い。この安全装置があつてこそ、極限材料の計算を信頼することができる。

最近の研究は速度となめらかさ、軽量性を同時に追求している。テンソル積を削減または排除して計算を高速化する。構造的枝刈りによってモデルを縮小し、電子密度の手掛かりで表現力を補う。こうした手法の多くは、まだ査読を経ていない初期の研究である。有望ではあるが、確定した標準と見なすにはまだ早い。

本章を読む一般読者が心に留めておくといふ点を5つにまとめる。原子計算には正確さと速さの長年にわたるトレードオフがあった。機械学習はこのトレードオフを緩和する架け橋となった。対称性を保つことは優れたモデルの核心である。いかに優れたモデルであっても、未知の瞬間を自ら知らせてこそ安全である。そして最新技術の多くは、まだ検証段階にある初期の研究である。

この5つの点は、以降の章にもそのまま通じる。結晶構造を生成し、合金を設計し、セラミックスを取り扱う作業は、すべてこの原子計算の上に成り立つ。正確な原子計算がなければ、その上の設計も揺らぐ。したがって、本章の内容が本書全体の礎となる。

一つのバランスの取れた視点も残しておく。MLIPは強力な道具であるが、万能ではない。学習データの質が悪ければ、予測も悪化する。検証を怠れば、もっともらしい誤差に欺かれる。そのため、この技術は人間の判断や実験に取って代わるものではない。計算によって候補を絞り込み、最終確認は実験が担う。この協力こそが、新材料を安全に世に送り出す道である。

これらすべての技術の目標は一つに集約される。ロケット材料や新素材をコンピュータ内で大規模かつ長期間にわたり、正確かつ安全に試験することである。実際の部品を製作する前に候補を選別すれば、費用と時間を節約できる。次章からは、このようにして固めた原子計算の上で、新素材を直接作り出していく話へと進む。

関連根拠資料

Kohn, W., & Sham, L. J. (1965). Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Physical Review*, 140, A1133-A1138. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.140.A1133>

- Behler, J., & Parrinello, M. (2007). Generalized neural-network representation of high-dimensional potential-energy surfaces. *Physical Review Letters*, 98, 146401. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.98.146401>
- Bartók, A. P., Payne, M. C., Kondor, R., & Csányi, G. (2010). Gaussian approximation potentials: The accuracy of quantum mechanics, without the electrons. *Physical Review Letters*, 104, 136403. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.104.136403>
- Bartók, A. P., Kondor, R., & Csányi, G. (2013). On representing chemical environments. *Physical Review B*, 87, 184115. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.87.184115>
- Zhang, L., Han, J., Wang, H., Car, R., & E, W. (2018). Deep potential molecular dynamics: A scalable model with the accuracy of quantum mechanics. *Physical Review Letters*, 120, 143001. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.120.143001>
- Schütt, K. T., Sauceda, H. E., Kindermans, P. J., Tkatchenko, A., & Müller, K. R. (2018). SchNet: A deep learning architecture for molecules and materials. *Journal of Chemical Physics*, 148, 241722. <https://doi.org/10.1063/1.5019779>
- Gasteiger, J., Groß, J., & Günnemann, S. (2020). Directional message passing for molecular graphs (DimeNet). *International Conference on Learning Representations*. <https://arxiv.org/abs/2003.03123>
- Batzner, S., Musaelian, A., Sun, L., Geiger, M., Mailoa, J. P., Kornbluth, M., Molinari, N., Smidt, T. E., & Kozinsky, B. (2022). E(3)-equivariant graph neural networks for data-efficient and accurate interatomic potentials (NequIP). *Nature Communications*, 13, 2453. <https://doi.org/10.1038/s41467-022-29939-5>
- Batatia, I., Kovács, D. P., Simm, G. N. C., Ortner, C., & Csányi, G. (2022). MACE: Higher order equivariant message passing neural networks for fast and accurate force fields. *Advances in Neural Information Processing Systems*, 35, 11423-11436. <https://arxiv.org/abs/2206.07697>
- Batatia, I., Batzner, S., Kovács, D. P., Musaelian, A., Simm, G. N. C., Drautz, R., Ortner, C., Kozinsky, B., & Csányi, G. (2025). The design space of E(3)-equivariant atom-centred interatomic potentials. *Nature Machine Intelligence*, 7, 56-67. <https://doi.org/10.1038/s42256-024-00956-x>
- Deng, B., Zhong, P., Jun, K., Riebesell, J., Han, K., Bartel, C. J., & Ceder, G. (2023). CHGNet as a pretrained universal neural network potential for charge-informed atomistic modelling. *Nature Machine Intelligence*, 5, 1031-1041. <https://doi.org/10.1038/s42256-023-00716-3>
- Yang, H., Hu, C., Zhou, Y., Liu, X., Shi, Y., Li, J., et al. (2024). MatterSim: A deep learning atomistic model across elements, temperatures and pressures. *arXiv:2405.04967*. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2405.04967>
- Deringer, V. L., Caro, M. A., & Csányi, G. (2021). Machine learning interatomic potentials as emerging tools for materials science. *Advanced Materials*, 33, 1902765. <https://doi.org/10.1002/adma.201902765>
- Shapeev, A. V. (2016). Moment tensor potentials: A class of systematically improvable interatomic potentials. *Multiscale Modeling and Simulation*, 14, 1153-1173. <https://doi.org/10.1137/15M1054183>
- Podryabinkin, E. V., & Shapeev, A. V. (2017). Active learning of linearly parametrized interatomic potentials. *Computational Materials Science*, 140, 171-180. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2017.08.031>
- Lysogorskiy, Y., Bochkarev, A., & Drautz, R. (2026). Graph atomic cluster expansion for foundational machine learning interatomic potentials (GRACE). *npj Computational Materials*, 12, 114. <https://doi.org/10.1038/s41524-026-01979-1>
- Reschützegg, T., Aykent, S., Perin, G. J., Nunes, B. H., Cipcigan, F., Ferreira, R. N. B., Steiner, M., & Thiemann, F. L. (2026). Equivariant interatomic potentials without tensor products (Geodite). *arXiv:2601.15492*. 査読前のプレプリント. <https://arxiv.org/abs/2601.15492>
- Wang, C., Hu, S., Tan, G., & Jia, W. (2026). Compact SO(3) equivariant atomistic foundation models via structural pruning. *arXiv:2605.08885*. 査読前のプレプリント. <https://arxiv.org/abs/2605.08885>
- Tan, C. W., Descoteaux, M. L., Kotak, M., de Miranda Nascimento, G., Kavanagh, S. R., Zichi, L., Wang, M., Saluja, A., Hu, Y. R., Smidt, T. E., Johansson, A., Witt, W. C., Kozinsky, B., & Musaelian, A. (2026). High-performance training and inference for deep equivariant interatomic potentials. *Digital Discovery*, 5, 1558-1567. <https://doi.org/10.1039/d5dd00423c>
- Miklaucic, N., Wei, L., Dong, R., Fu, N., Omee, S. S., Li, Q., Dey, S., Fung, V., & Hu, J. (2025). Facet: Highly efficient E(3)-equivariant networks for interatomic potentials. *arXiv:2509.08418*. 査読前のプレプリント. <https://arxiv.org/abs/2509.08418>
- Han, K., Cong, H., Deng, B., & Barati Farimani, A. (2026). Smooth dynamic cutoffs for machine learning interatomic potentials. *arXiv:2601.21147*. 査読前のプレプリント. <https://arxiv.org/abs/2601.21147>
- Xu, H., Cui, T., Tang, C., Ma, J., Zhou, D., Li, Y., Gao, X., Gong, X., Ouyang, W., Zhang, S., & Su, M. (2025). Evidential deep learning for interatomic potentials. *Nature Communications*, 16, 937. <https://doi.org/10.1038/s41467-025-67663-y>
- Kulichenko, M., Barros, K., Lubbers, N., Li, Y. W., Messerly, R., Tretiak, S., Smith, J. S., & Nebgen, B. (2023). Uncertainty-driven dynamics for active learning of interatomic potentials. *Nature Computational Science*, 3, 230-239. <https://doi.org/10.1038/s43588-023-00406-5>
- Perez, D., Subramanyam, A. P. A., Maliyov, I., & Swinburne, T. D. (2025). Uncertainty quantification for misspecified machine learned interatomic potentials. *npj Computational Materials*, 11, 263. <https://doi.org/10.1038/s41524-025-01758-4>
- Yang, Z., Wang, X., Li, Y., Lv, Q., Chen, C. Y.-C., & Shen, L. (2025). Efficient equivariant model for machine learning interatomic potentials. *npj Computational Materials*, 11, 49. <https://doi.org/10.1038/s41524-025-01535-3>
- Shuang, F., Ying, P., Liu, K., Wei, Z., Liu, F., Fan, Z., Jiang, M., & Dey, P. (2026). Benchmarking chemically scalable machine-learning interatomic potentials for large-scale simulations of multicomponent alloys. *arXiv:2604.01642*. 査読前のプレプリント. <https://arxiv.org/abs/2604.01642>

- Arnold, J. E., Woodgate, C. D., Hafizi, R., Harris, M. J., Mottura, A., García Fuentes, G., & Gurrutxaga-Lerma, B. (2026). Thermodynamics and phase stability of the AlTiCrMoW high-entropy alloy simulated using machine-learned interatomic potentials. *Physical Review Materials*, 10, 073605. <https://doi.org/10.1103/5tz1-zg9z>
- Chiang, Y., Kreiman, T., Zhang, C., Kuner, M. C., Weaver, E. J., Amin, I., Park, H., Lim, Y., Kim, J., Chrzan, D., Walsh, A., Blau, S. M., & Asta, M. (2025). MLIP Arena: Advancing fairness and transparency in machine learning interatomic potentials via an open, accessible benchmark platform. *Advances in Neural Information Processing Systems*, 38. <https://arxiv.org/abs/2509.20630>

第2章 生成AIと拡散モデル（Diffusion Models）基盤の結晶構造予測（CSP）および材料逆設計

はじめに

私たちは物を作るとき、通常は材料から選ぶ。銅を作るとしよう。まず鉄やアルミニウムを決める。その次に厚みと形状を決める。最後に火にかけてどのような性質が現れるかを確認する。

新材料を探す従来の方法もこれと似ている。まず、すでに知られている物質の一つを選ぶ。その次にコンピュータや実験で性質を測定する。良ければ残し、悪ければ捨てる。この方法は信頼できる。しかし、一つずつ確認しなければならないため速度が遅い。

問題は物質の世界があまりにも広い点にある。元素の種類が多い。原子の数も変えられる。原子が配置される位置や格子の大きさも変えられる。これらすべてを組み合わせると、組み合わせの数は夜空の星のように膨大になる。人間が一つずつ試しては到底終わりが見えない。

本章は思考の方向を逆転させる話である。材料から選ぶのではない。望む性質から決める。電気がよく通る固体電解質がほしいと決める。高温のロケットノズルで耐える触媒がほしいと決める。すると人工知能がその性質に合った結晶構造を自ら描いてくれる。このような手法を材料逆設計（Inverse Design）という。

逆設計がなぜ重要であるかは料理に例えられる。従来の方法は冷蔵庫にある材料で料理を作る作業である。材料が決まっているため、作れる料理も決まってくる。逆設計は食べたい料理をまず決める作業である。その料理に必要な材料を逆に探す。冷蔵庫になかった材料も新たに手に入れる。こうすれば冷蔵庫の中の材料に縛られず、思い描いていた料理に近づける。

ここでの主役は生成人工知能（Generative AI）である。絵を描く人工知能を思い浮かべると分かりやすい。ぼやけた点の集まりから始まる。ノイズを少しずつ消していく。その先に人の顔や風景が現れる。材料逆設計も原理は同じである。ぼやけた原子の集まりから始まる。ノイズを消しながら規則的な結晶を作り出す。このノイズ除去の手法を拡散モデル（Diffusion Model）と呼ぶ。

本章では、拡散モデルが結晶をどのように作るのかを一つずつ見ていく。対称性の規則を守る方法を見る。計算を高速化するフロー・マッチング（Flow Matching）技術を見る。空き位置を埋めるインペインティングとミラージュ原子という新しい着想も見る。強化学習によって望ましい構造へと導く方法も見る。最後にバッテリーの固体電解質や触媒、航空宇宙用合金にこの手法が実際に使われた事例を検討する。ロケットと新材料がなぜこの技術を必要とするのかを一つずつ解き明かしていく。

1. 材料から選ぶ手法から性質から決める逆設計へ

本節で扱うのは、材料探索の方向がどのように変化したかである。従来の方法は材料を先に選び、性質を後から確認する。新しい方法は性質を先に決め、材料を後から作る。なぜこの転換が必要なのか、ロケットと新材料にどのような意義があるのかを検討する。

従来の方法を順方向物性スクリーニング（Forward Property Screening）という。順方向という言葉は、材料から性質へと進むという意味である。スクリーニングとは複数の候補を絞り込む作業である。研究者はすでに知られている結晶データベースから候補を取り出す。代表的な保管場所が二つある。マテリアルズ・プロジェクト（Materials Project）と無機結晶構造データベース（ICSD）である。

候補を取り出した後は性質を計算する。このとき密度汎関数理論（Density Functional Theory, DFT）という物理計算を用いる。この計算は原子内の電子の運動を解いてエネルギーと性質を求める。結果は正確である。しかし計算量が多い。コンピュータを長時間稼働させなければならない。そのため、1日に検討できる候補の数が少ない。

この方法の根本的な限界は、狭い檻に閉じ込められている点にある。調査はすでに知られている物質に対してのみ行われる。データベースにない新物質は最初から候補に挙がらない。性質の優れた未知の物質が存在していても手が届かない。このように従来の方法は、新しいものを生み出す力が弱い。

材料逆設計はこの檻を打ち破る。順序を逆転させる。まず目標とする性質を決める。イオン伝導度が高くなければならないと決める。熱力学的に安定していなければならぬと決める。その次に人工知能がその条件を満たす構造を直接描く。データベースになかった構造も描き出す。検査から創造へと材料探索の重心が移っていく。

組み合わせの数がどれほど膨大であるか例を挙げてみる。元素は自然界で90種類ほど利用できる。箱の中に原子を10個だけ配置するとしよう。位置ごとにどの元素を入れるかを選ぶ。原子の位置も少しずつ変えられる。この組み合わせを考えるだけでも天文学的な数になる。海岸の砂粒よりも多くの候補が生まれる。人間が一つずつ計算しては一生を費やしても終わらない。

計算一つにかかる時間も侮れない。DFT計算は原子が多くなるほど時間がかかる。原子数が2倍になれば、計算量は何倍にも増える。大きな構造の一つ解くのにコンピュータが何日も稼働する。そのため、やみくもに多くの候補を計算することはできない。候補を事前によく選別しなければならない。どの候補を先に計算すべきかを選び出す知恵を人工知能がもたらす。

一つの結晶を描く作業は、三つの要素を同時に決める作業である。まず格子（Lattice）を決める。格子とは原子が収まる箱の形状と大きさである。次に原子の位置を決める。箱の中のどこに原子が配置されるかである。最後に原子の種類を決める。その位置にどの元素が入るかである。三つが互いに適合して初めて真の結晶となる。一つでもずれると原子が衝突したり構造が崩壊したりする。

これら三つを一度に扱うのは難しい。格子は長さや角度を持つ連続値である。原子の位置も連続値である。しかし原子の種類は離散的な値である。塩素の次に「半分塩素」のような元素は存在しない。このように性質の異なる値を同時に扱わなければならない。拡散モデルがこの困難な課題を成し遂げる。連続値と離散値を並べてノイズから復元する。

拡散モデルの原理をもう少し詳しく説明する。学習には二つの方向がある。まず順方向において、綺麗な結晶にノイズを少しずつ加えていく。何度も加えると結晶は無秩序な点の集まりへと変わる。人工知能はこの過程を逆に戻す方法を学ぶ。ノイズが混ざった状態から元の結晶を当てる練習をする。この練習を終えると、無秩序な点から新しい結晶を作り出すことができる。

この手法の強みは、データを的確に学習できる点にある。世界で知られている数万個の結晶をモデルに見せる。モデルはどのような配置がもっともらしいかという感覚を身につける。原子同士が保つべき距離を学ぶ。どの元素がどの位置に入りやすいかを学ぶ。そうして得た感覚をもとに新しい結晶を提案する。人間がルールを一つひとつ書き下さなくても自ら習得する。

逆設計は規則的な結晶にとどまらない。ガラスのように原子が無秩序に並んだ物質もある。このような物質を非晶質（Amorphous）という。2025年に発表されたある研究では、拡散モデルを用いて非晶質構造を生成した。従来の計算手法よりも数千倍高速に生成した。組成やプロセス条件を変えながら多様な構造を生み出した。逆設計の適用範囲が結晶の外側にも広がっているわけである。

逆設計モデルは化学規則も学習する。原子ごとに隣接原子と形成できる結合の数が決まっている。この数を原子価（Valence）という。原子価に違反すると存在し得ない構造が生じる。2026年に発表されたある研究では、この原子価の規則を生成プロセスに組み込んだ。その結果、実際に存在可能な物質のみを選び出した。物理と化学の常識をモデルに組み込む流れが続いている。

ロケットと新材料において、この転換が持つ意義は大きい。ロケットは極限環境に耐えうる材料を必要とする。燃焼室は高温になる。ノズルは高速のガスによって削られる。バッテリーは軽量で安全でなければならない。これらすべての条件を満たす物質は自然界には滅多に存在しない。だからこそ、存在しないものを新たに描く逆設計が必要となる。人工知能は人間が足を踏み入れたことのない物質空間を代わりに歩んでくれる。

2. 結晶の対称性規則を守る生成モデル

本節で扱うのは結晶の対称性規則である。結晶は原子をやみくもにばらまいた集まりではない。規則に従って原子が繰り返される秩序である。人工知能がこの規則を知らなければ、架空の結晶を描いてしまう。対称性をどのようにモデルに組み込むのかを2世代のモデルに分けて検討する。

結晶を理解するには、まず対称性という言葉の把握しなければならない。対称性とは、どのような操作を行っても形状が不変である性質のことである。紙を半分に折ったときに両側が重なれば左右対称である。結晶にはこのような対称性が幾重にも重なり合っている。横に平行移動しても同じであり、回転させても同じであり、鏡に映しても同じである。

このような対称性規則をすべて集めて分類したものが空間群（Space Group）である。3次元結晶には空間群が正確に230種類存在する。一つの結晶はこの230種類のいずれかに属する。この分類は理想的な3次元周期結晶に当てはまる。ガラスのような非晶質や準結晶はここから外れる。空間群が分かれば、その結晶の繰り返しと回転の規則をすべて把握したことになる。

空間群の中には、原子が配置されうる決まった位置が存在する。この位置の集まりをワイコフ位置（Wyckoff Position）という。ワイコフ位置は単一の位置ではなく、対称性によって結びつけられた位置の集合である。一つの位置に原子を置くと、対称性規則によって対となる位置にも同じ原子が配置される。鏡の前にボールを置くと鏡の中にもボールが現れるのと同じである。そのため、一つの位置を決めると複数の原子の位置が一度に決定される。この集まりにいくつの位置が含まれるかを多重度（Multiplicity）という。生成モデルがこの規則を受け入れれば、原子同士が重なり合う事態を避けることができる。

空間群の強みは、少ない情報で全体を描き出せる点にある。対称性の高い結晶は、ごく少数の原子を決めるだけでよい。残りは対称性規則が自ずと満たしてくれる。雪の結晶を思い浮かべると分かりやすい。6方向に伸びた形状は同一である。1方向だけ描けば、残りの5方向は回転させることで得られる。結晶もこのように小さな断片から全体が定まる。

生成モデルがこの規則を知らないと問題が生じる。人工知能が原子を一つずつ自由に配置するとしよう。わずかな計算ノイズが混ざるだけでも対称性が崩れてしまう。対称性がほとんどない結晶をP1と呼ぶ。P1も厳然たる正式な空間群である。実際にP1に属する物質も存在する。そのため、P1であるという理由だけで架空のものと決めつけることはできない。問題は、高い対称性を持つべき結晶がP1へと崩壊してしまう場合である。このときは原子間距離やエネルギー、安定性を個別に検証しなければならない。

そのため最新の研究では、対称性規則をモデルにあらかじめ組み込もうとしている。原子を一つずつ配置する代わりに別の手順を踏む。まず対称性がすべて込められた小さな基本単位を作る。その次に対称性規則を適用して結晶全体を展開する。こうすることで、生成物が対称性を維持する可能性が高まる。

対称性を扱う優れた方法として、同変性（Equivariance）という性質がある。同変性とは、入力を回転させると出力も同様に回転する性質である。手袋を例にすると分かりやすい。右の手袋を裏返すと左の手袋になる。手と手袋が同時に反転する。結晶モデルが同変性を備えていれば、構造を回転させても性質は不変である。対称性を無理に合わせなくても自ずと保たれる。

この同変性を備えたニューラルネットワークを用いれば、学習が容易になる。モデルが自ら対称性を理解しているためである。同じ構造を様々な角度から見せる必要がない。データが少なくても十分に学習できる。そのため最新の結晶生成モデルは同変性を重要なツールと位置づけている。この性質は、今後登場するフロー・マッチングモデルにおいても中核となる。

2026年に発表された結晶生成モデルの総合レビューは、この潮流を的確に整理している。レビューでは、対称性を維持する能力が優れた結晶生成モデルの中核条件であると指摘している。対称性を守るモデルの方が安定した候補をより多く生成できると見なしている。このレビューは拡散モデルとフロー・マッチングモデルを並べて比較している。

2.1 結晶生成拡散の出発点（CDVAE）

結晶生成拡散の研究は、ある初期モデルから出発した。このモデルの名がCDVAEである。何が優れており、何が不足していたのかを一つずつ検討する。

CDVAEは結晶拡散変分オートエンコーダ（Crystal Diffusion Variational Autoencoder）の略称である。このモデルは2022年に発表され、この分野の扉を開いた。結晶格子と原子位置、原子の種類を同時に扱う初の拡散フレームワークを構築した。

CDVAEの大きな功績は、周期境界条件（Periodic Boundary Condition）を考慮した点である。周期境界条件とは、結晶が同じ形で果てしなく繰り返されるという意味である。壁紙の模様を思い浮かべるとわかりやすい。1つのピースが上下左右につながり、壁全体を覆う。結晶も小さな単位が繰り返されて塊を成す。

このモデルは、原子の位置をランジュバン動力学（Langevin Dynamics）という手法で少しずつ動かす。このとき原子を押す方向は、モデルが学習した確率の勾配である。実際の原子間の力や自由エネルギーとは異なる。そのため、この過程だけで安定な構造が保証されるわけではない。生成でおおよその骨組みを捉えた後、DF Tで構造を再び整える。この2つの段階を分けて捉える必要がある。

しかし、CDVAEには明確な限界がある。空間群の対称性を直接固定することができない。原子を自由に動かすため、対称性が容易に崩れてしまう。その結果、生成された構造が対称性の失われたP1状態へと崩壊することが度々あった。対称性が不可欠な結晶では、別途さらなる検証を行わなければならなかった。

もう一つの限界は、原子数をあらかじめ決めなければならない点である。このモデルは、まず原子数を予測した上で、その数に合わせて構造を生成する。数が固定されると柔軟性が低下する。原子が抜けたり追加されたりする状況を扱うことが難しい。この限界は、後述するミラージュ原子の手法によって解決されることになる。

このような不足は欠点ではなく足がかりである。CDVAEが投げかけた課題が次世代モデルの目標となった。対称性をいかに維持するか。原子数をいかに自由に扱うか。これら2つの問いがその後の研究を牽引した。初期モデルの限界を知ることが発展の出発点である。

2.2 対称性を考慮した条件付き拡散モデル

次世代モデルは、対称性の規則を最初から守ろうとした。名称が似ている2つの研究を混同しないよう、分けて説明する。性能の数値は検証された範囲内でのみ慎重に扱う。

対称性を考慮したモデルの核となる考え方は単純である。原子を一つひとつ自由に配置するのではない。まず非対称単位（Asymmetric Unit）を作成する。非対称単位とは、対称性の規則によって結晶全体を生成できる最小の原子の集まりである。この小さな種に対して空間群の対称操作を適用する。この操作を経ることで、種が結晶全体へと展開される。

この方式の利点は、対称性が自然と保たれる点にある。種を対称性の規則で展開したため、結果に対称性が組み込まれている。原子を個別に合わせる必要がない。折り紙を思い浮かべるとわかりやすい。一度折って切り抜けば、広げたときに左右がまったく同じになる。対称性認識モデルは結晶をこのように切り抜く。

ここで、名称が似ている2つの研究を区別する必要がある。一つはSymmCDである。対称性を保存する結晶生成拡散モデルである。Levyらが2025年の国際学習表現会議（ICLR）で発表した。査読を経た正式な論文である。この論文の識別番号はarXiv:2502.03638である。

もう一つは、ワイコフ位置を扱う別個の研究である。Ishiiらが2026年に発表したプレプリントである。プレプリント（preprint）とは、査読をまだ経ていない初期の研究である。この論文はWyckoffDiff-Adaptorという手法を提案している。識別番号はarXiv:2601.08115である。2つの論文は目標こそ似ているが、手法と著者が異なる。本書はこれら2つの研究を混同せず、個別に紹介する。

CDVAEと対称性認識モデルの間には架け橋となるモデルもある。その一つがDiffCSPである。このモデルは、格子と分数座標をともに拡散によって生成する。分数座標とは、ボックスのサイズを1としたときの相対位置である。DiffCSPはCDVAEよりも対称性をより良く保持した。対称性を直接組み込む後続世代のモデルへと続く道を切り開いた。このようにモデルは一世代ごとに不足を補いながら前進している。

性能の数値を扱う際には慎重でなければならない。対称性保存率が98パーセントを超えるという数字もあるが、原典において確定されたものではない。そのため本書では、特定の数値を確定した性能のように記述することはない。代わりに方向性として理解する。対称性認識モデルは従来のモデルよりも対称性をよく保つ。その結果、実際の結晶に近い候補をより多く提示する。

対称性認識モデルは条件付き生成も巧みに扱う。条件付き生成（Conditional Generation）とは、望む性質を条件として与える方式である。バンドギャップという値を指定したとしよう。バンドギャップは半導体の性質を左右するエネルギーの閾値である。モデルはそのバンドギャップに合致する結晶だけを選んで描く。このように条件を設定すれば、目標に合った候補だけが集まる。そのおかげで、無駄な候補を抽出するロスが大幅に削減される。

2026年に出されたあるプレプリントは、この条件付き生成をさらに推し進めた。結晶構造と電子特性を同時に生成した。電子特性を併せて学習することで、目標とする性質をより正確に再現した。バンドギャップと形成エネルギーを条件として与えた試験において成功率が向上した。安定かつ新規な候補の割合も高まった。対称性と条件を同時に扱う流れが続いている。

この技術が新素材になぜ必要なのかを確認する。対称性は物質の性質と深く結びついている。対称性が崩れた不正確な構造は、性質の予測も狂ってしまう。航空宇宙用合金やバッテリー材料は、実際の合成につながってこそ意味がある。対称性を維持する生成モデルは無駄な候補を減らす。その分、実験へと進む候補の質が高まる。

3. 結晶をより速く作るフローマッチング

拡散モデルは正確であるものの、ステップ数が多く低速である。フローマッチングはステップ数を減らして速度を高める。結晶が存在する曲がった空間をどのように扱うかも併せて見ていく。

まず拡散モデルがなぜ遅いのかを知る必要がある。拡散モデルはノイズを少しずつ除去しながら構造を生成する。一度にわずかずつつしか除去しない。そのため、完成までに数百から数千ステップを要する。ステップ数が多いと計算に時間がかかる。候補を1つ生成するのに時間を要する。大量の候補を抽出する必要がある材料探索において、この時間は大きな負担となる。

フローマッチング（Flow Matching）はこの問題を別の角度から解決する。ノイズを少しずつ消していく代わりに、近道を学習する。初期状態から目標状態へと真っ直ぐ進む経路を習得する。川の流れを思い浮かべるとわかりやすい。水路が決まれば、木の葉はその経路に沿って流れていく。フローマッチングは、水が流れるこの水路そのものを学習する。

水路を数式で表すと常微分方程式になる。常微分方程式（Ordinary Differential Equation）とは、値の変化を記述した方程式である。時間に伴って値がどのように変化するかを示す。フローマッチングはこの方程式に従って始点から終点まで進む。拡散は毎ステップ無作為に揺らぐが、この経路はそうではない。始点が決まれば最後まで定まった経路を進む。そのため経路が直線的でステップ数が少なくて済む。ただし、その始点自体は依然として無作為にサンプリングされる。経路が決まっているからといって、格子の角度や体積の歪みが自然に減少するわけではない。

拡散とフローマッチングの違いは、山を下りる作業に例えることができる。拡散は霧の中で一步一步手探りで下りてくる。慎重ではあるが遅い。フローマッチングはあらかじめ把握した登山道に沿って下りてくる。道を知っているため大股で速く進める。どちらの方式も麓の目的地に到達するが、所要時間が異なる。

結晶を扱う際には、空間が平坦ではないという難しさがある。格子は長さや角度を持つ。原子座標は繰り返されるボックス内の位置である。このような空間は紙のように平坦ではなく、球のように曲がっている。曲がった空間をリーマン多様体（Riemannian Manifold）と呼ぶ。

曲がった空間を平坦な紙のように扱うと誤差が生じる。地球儀を平らな地図に広げると面積が歪むのと同じである。極地方が実際よりも大きく描かれてしまう。結晶も同様である。格子の角度や体積が歪んでしまう。そのためフローマッチングは、最初から曲がった空間の物差しを用いる。この物差しをリーマン計量（Riemannian Metric）という。曲がった空間を曲がったまま扱うため、歪みが減少する。

3.1 曲がった空間の上で近道を探す

フローマッチングが曲がった空間をどのように扱うかを代表的なモデルを通じて見ていく。検証された論文を中心に説明する。

曲がった空間で近道を探すことは、地球上の飛行に似ている。ソウルからニューヨークへ行く近道は、地図上の直線ではない。地球が丸いからである。実際の近道は地球の表面に沿って湾曲した曲線である。このような曲線を測地線（Geodesic）と呼ぶ。結晶生成も曲がった空間の上で測地線に沿って進む。

この考え方を結晶に初めて巧みに適用したモデルがFlowMMである。FlowMMはリーマンフローマッチングを結晶に合わせて拡張したモデルである。結晶特有の対称性を併せて考慮する。並進、回転、原子の順序の入れ替え、周期境界条件をすべて扱う。このモデルは、安定な物質を見つけるためのステップ数を大幅に削減した。公開された論文では、従来の手法よりも約3倍少ないステップ数で安定な候補を発見したと報告されている。

FlowMMは2つの役割を果たす。一つは、組成が決まっているときに安定な構造を予測することである。もう一つは、新たな組成とその構造を同時に提案することである。前者の役割を結晶構造予測（Crystal Structure Prediction）と呼ぶ。後者の役割こそが真の新規物質の探索である。フローマッチングはこれら2つのタスクをいずれも高速にこなす。そのため、材料探索のさまざまな場面で幅広く活用されている。

もう一つの検証された事例はCrystalFlowである。この研究は2025年に『ネイチャー・コミュニケーションズ（Nature Communications）』に掲載された。査読を経た正式な論文である。CrystalFlowはフローベースの生成モデルによって結晶物質を生成する。格子と原子配置を同時に生成する。フローマッチングが拡散モデルよりも学習を容易にすることを示した。

フローマッチングは有機結晶にも用いられる。2026年に出されたあるプレプリントは、単位格子フローマッチング（Unit Cell Flow Matching）を用いた。この手法によって有機結晶の構造を高速に予測した。この研究は無機結晶専用モデルではない。そのため、無機材料の結果へと拡大解釈しないよう注意が必要である。ただし、フローマッチングが多様な結晶に幅広く用いられることを示している。

速度がなぜ重要なかをロケットと結びつけて考えてみる。材料の逆設計では、多数の候補を抽出してスクリーニングしなければならない。1万個を抽出しても、有用なものは数個にすぎないこともある。候補を1つ生成する時間が長ければ、探索全体が停滞してしまう。フローマッチングはこのボトルネックを解消する。同じ時間内により多くの候補を抽出できる。航空宇宙用材料のように条件が厳しい分野であるほど、この速度が大いに役立つ。

フローマッチングはステップ数をどれほど減らすのだろうか。FlowMMの論文は、安定な候補を見つけるステップ数を約3倍減らしたと報告している。拡散モデルが歩んでいた経路をより少ないステップで進む。候補を1つ生成する時間がそれだけ短縮される。100倍や1日が数分に短縮されるといった大げさな数字には根拠がない。報告された値だけを見ても、候補を多く抽出するほど節約される時間が積み上がっていく。

フローマッチングにも残された課題がある。近道を学習するには、目標の分布を十分に把握していなければならない。学習データが不足していれば見当違いの経路を学習してしまう。曲がった空間の計算も依然として厄介である。そのため、フローマッチングがすべての拡散モデルに取って代わるわけではない。問題に応じて2つの手法を使い分ける。正確さが急務であれば拡散を用い、速度が急務であればフローマッチングを用いる。

4. 一部の描き直しと原子数の自律的決定

結晶を常に白紙から描く必要はない。既存の構造から一部だけを変更する方法もある。空孔や欠陥を埋めるインペインティングがそのような手法である。原子数が決まっていない問題を扱うミラージュ原子という発想もある。

まずインペインティング (Inpainting) という概念を把握しておく必要がある。インペインティングとは、空白の部分を自然に補完する技術である。写真編集でよく見られる。写真の中の電柱を消すと、その部分が空白になる。人工知能が周囲の空を見てその空白を埋める。結晶構造においても同様の処理を行う。結晶では、空いた原子位置や欠陥位置を自然に埋めてくれる。

白紙から結晶を描くこととインペインティングは異なる。白紙生成は原子を一つも配置せずに開始する。インペインティングは既存の構造から開始する。一部のみを空白にしてその部分だけを描き直す。残りはそのまま維持する。2つの手法は用途が異なる。完全に新しい物質を探索するときは白紙生成を用いる。優れた物質を改良するときはインペインティングを用いる。

材料研究においてこの技術が必要とされる理由がある。実務では結晶全体を新しく描くことは稀である。すでに優れた母体結晶 (Host Matrix) が存在する場合が多い。ここに他の元素を微量に追加したり取り除いたりして性質を変える。このように原子の一部を他の原子に置き換えることをドーピング (Doping) と呼ぶ。原子が抜け落ちたり別の位置に入り込んだりした状態を欠陥 (Defect) と呼ぶ。

ドーピングは半導体産業が古くから用いてきた手法である。純粋なケイ素は電気をほとんど通さない。ここにリンやホウ素をごく微量に加える。そうすると電氣的性質が大きく変化する。スマートフォン内部のチップはこの原理で動作する。結晶インペインティングは、このドーピング設計を人工知能に任せる。どの位置にどの元素を入れるかをモデルが提案する。

この小さな変化が性質を大きく変える。塩に他の物質をごくわずかに混ぜるだけでも味が変わることに似ている。結晶の原子を一つ置き換えるだけで電気伝導度が変わる。触媒性能が変わる。そのため、どこに何を投入するかを精密に設計しなければならない。インペインティングはこの精密設計を支援する。母体はそのまま維持し、変更する位置だけを描き直す。

インペインティングが白紙からの生成よりも実用的である理由がある。優れた母体結晶を見つけること自体に長い時間がかかる。すでに検証された母体があれば、その上で改善する方が迅速である。頑丈な家を新築する代わりに部屋を一つだけ改修することに似ている。基礎が揺らぐことがないためリスクが少ない。そのため実務の研究者はインペインティング手法を好んで用いる。

空位を埋めるには周囲の原子をよく観察しなければならない。無作為に元素を投入すれば構造が崩壊する。隣接する原子とサイズが適合していなければならない。電氣的な均衡も保たれる必要がある。人工知能は母体の規則を学習し、これらの条件を満たす。マスキング (Masking) という手法で変更する位置のみを覆い隠す。覆い隠した位置のみを描き直し、残りは固定する。

4.1 原子数を自律的に決定するミラージュ原子拡散 (MiAD)

原子数を自在に扱う手法としてMiADと呼ばれるプレプリントモデルがある。ミラージュ原子という発想がなぜ有用であるかを考察する。

MiADはミラージュ原子拡散 (Mirage Atom Diffusion) の略称である。2025年末に発表されたプレプリントである。査読を経る前の初期研究段階にある。正式なタイトルは、新しい結晶をゼロから生成する拡散モデルという意味を含んでいる。識別番号はarXiv:2511.14426である。

このモデルの中核をなす発想はミラージュ原子である。ミラージュとは蜃気楼という意味である。ミラージュ原子は、実際の原子になることもあれば消滅することもある仮想のサイトである。モデルはまず空間内に仮想のサイトを十分に配置する。その後、拡散プロセスにおいて各サイトが真の原子であるか空位であるかを判定する。実際に残るサイトには元素が配置され、そうでないサイトは消滅する。

この手法の利点は、原子数をあらかじめ固定しない点にある。従来のモデルは原子数を事前に決定した後に構造を生成していた。MiADは仮想サイトをオン・オフしながら原子数を自律的に決定する。この論文が実際に示したのは、原子数を自律的に決定する生成である。欠陥濃度やドーピング位置、非化学量論性まで検証した研究ではない。ただし、原子数が流動的な物質にこの手法を適用できる余地がある。

元素比率が整数比にならない物質を非化学量論的化合物と呼ぶ。このような物質は実際の材料に多く見られる。原子が一つ抜けた空位が性質を変える。複数の欠陥が集まった欠陥クラスターも生じる。余剰スペースに原子が割り込む侵入型も存在する。この微細な乱れが伝導度や強度を左右する。原子数を自在に扱う生成手法は、こうした乱れを表現する手がかりとなる。

MiADはベンチマークテストにおいて結果を報告した。広く用いられているMP-20というテストセットを使用した。安定的で（Stable）、固有であり（Unique）、新規である（Novel）結晶の割合を示す指標をSUN比率と呼ぶ。論文はこの指標において一定の成果を報告した。ただし、この数値はプレプリント段階のものである。したがって確定した性能ではなく、初期段階の結果として受け止める必要がある。

この技術がロケットや新素材に持つ意義を考察する。実際の航空宇宙用材料は完全に規則的ではない。原子がわずかに欠落したり位置が変わったりした欠陥が常に存在する。この欠陥が強度や伝導度を左右する。原子数を自在に扱えるモデルは、こうした現実の構造をより適切に表現する。それだけ実験室の結果に近い候補を導き出せる。ただし、この手法はまだプレプリント段階であるため、欠陥設計の性能はさらに検証される必要がある。

5. 強化学習による優れた候補への誘導

生成モデルは多数の候補を出力する。しかし、そのすべてが有用であるわけではない。強化学習によって優れた候補に向けて方向付ける。強化学習がどのように誘導するのか、その原理と安全装置を考察する。

強化学習（Reinforcement Learning）は報酬を手がかりに行動を修正する学習である。子犬の訓練を思い浮かべると理解しやすい。上手にできればおやつを与える。できなければ与えない。子犬はおやつを得られる行動を増やしていく。人工知能も高い報酬を得られる行動を増やしていく。

材料生成においては、優れた構造に対して高い報酬を与える。安定的で物性に優れた結晶に高いスコアを与える。原子が衝突していたり不安定であったりする構造には低いスコアを与える。モデルは高スコアを獲得する方向へと生成パターンを変化させる。そのため、試行を重ねるほど実用的な候補が増加する。

生成モデルと強化学習は役割が異なる。生成モデルはもっともらしい候補を幅広く提示する。強化学習はその候補を目標に向けて誘導する。種をまく手と水路を引く手が異なるのと同じである。両方の手が連動してこそ実りが得られる。生成だけでも、強化学習だけでも不十分である。両者を組み合わせることで、望ましい性質に近づくことができる。

この手法が必要とされる理由がある。生成モデルはもっともらしい候補を上手に作り出す。しかし、もっともらしさと実際の安定性は異なる。外見が整っていても熱力学的に崩壊する構造が多い。そのため生成だけでは不十分である。安定性と新規性、そして合成可能性を総合的に検討しなければならない。強化学習はこれら3つの要素を報酬に組み込み、モデルを誘導する。

合成可能性は取り扱いが難しい目標である。計算上で安定な物質であっても、実験室で合成できない場合がある。合成経路が極めて困難であったり、原料が存在しなかったりすることがあるためである。したがって安定性だけを確認するのでは不十分である。実際に作製可能かどうか併せて評価しなければならない。強化学習の報酬は、このような現実的条件まで包含しようとする。そうして初めて実験室へと移行できる候補が得られる。

強化学習を材料生成に適用する手法も多岐にわたる。代表的なものとして近傍方策最適化（Proximal Policy Optimization）という手法がある。この手法は方策を一度に少しずつのみ変更する。急激に大きく変更すると学習が不安定になるためである。少しずつ慎重に進めながら報酬を増大させる。これにより安定的に性能を向上

させることができる。この手法は言語モデルの微調整にも広く用いられている。

2025年に発表されたあるプレプリントは、この方向性を明確に示している。拡散モデルを強化学習でファインチューニングし、逆設計の成功率を向上させた。目標とする性質に合致する構造をより多く生成した。安定性、固有性、新規性の条件を満たす割合も向上した。この研究は初期段階にある。そのため産業への適用には、DFT計算や実験による合成を通じたさらなる検証が必要である。

5.1 強化学習の安全装置と性能指標

強化学習には2つの安全装置が存在する。1つはモデルが過度に逸脱しないように制御する装置である。もう1つは優れた候補を保存して再利用する装置である。性能を測定する指標についても併せて考察する。

強化学習には潜在的なリスクが存在する。報酬のみを追求すると、異様な構造に偏ってしまう。高いスコアを与える狭い領域に閉じ込められる。多様な候補を失い、1つの解のみを繰り返すようになる。この現象をモード崩壊（Mode Collapse）と呼ぶ。崩壊が生じると探索が停止する。

これを防ぐ装置がKL正則化（KL Regularization）である。KLは2つの分布がどれほど異なるかを測る尺度である。この装置は、ファインチューニングされたモデルが本来学習した分布から過度に離れないように制御する。ゴム紐で結ばれている状態に似ている。新たな方向へ進みつつも、根底から大きく外れると引き戻される。そのため優れた候補を探索しながらも多様性を維持できる。

もう1つの装置は経験再生（Experience Replay）である。良好であった候補を破棄せずに保存する。保存した候補を再び取り出して学習に用いる。試験で正解した問題を復習ノートにまとめて解き直すことに似ている。このようにすることで、苦労して見つけ出した優れた構造を忘れることがない。学習がより安定して継続する。

性能を測定する際によく用いられる指標がSUN比率である。SUNは安定的で（Stable）、固有であり（Unique）、新規である（Novel）結晶を意味する。3つの条件をすべて満たす候補の割合である。安定的であるとは、容易に他の物質へ分解しないことを意味する。固有であるとは、生成物同士が重複しないことを意味する。新規であるとは、データベースに存在しなかった物質であることを意味する。

安定性を測定する際にはハル上エネルギー（Energy above Hull）と呼ばれる値を確認する。この値は絶対零度においてDFTで計算された値である。値が低いほど計算上安定である。値が0に近ければ計算上は構造がよく維持される。しかし実際の温度や圧力、水や酸素、反応速度はここには反映されない。計算誤差も存在する。したがってこの値は、計算上の安定候補を示す指標として読み解く必要がある。強化学習の報酬はこの値を重要な要素として利用する。

報酬は複数の目標を天秤にかけて同時に評価する。安定性のみを追求すると性質が平凡な物質が得られる。性質のみを追求すると合成が困難な物質が得られる。そのため安定性、物性、新規性のそれぞれに重みを与える。どの目標をより重視するかを重みによって調整する。この重みの調整こそが設計者の役割である。目標に合わせて天秤を調整することで、望ましい方向へと候補が集約される。

これらの安全装置がロケット材料の設計に持つ意義を考察する。航空宇宙用材料は実際に合成されてこそ意味を持つ。机上だけで優れた構造は役に立たない。強化学習は合成可能性を報酬に組み込む。KL正則化と経験再生が探索を安定的に保つ。その結果、実験室での検証へと移行可能な候補の割合が高まる。

6. 逆設計パイプラインの実務適用事例

前述の技術は実際の研究においてどのように活用されたのだろうか。バッテリーの固体電解質や触媒、航空宇宙用合金を対象に見ていく。検証された最新の研究を根拠とする。生成、計算、実験がどのように連動しているかを考察する。

これまで扱ってきた技術を実際に適用するには、複数のツールを連携させる必要がある。拡散モデルとフロー・マッチングが候補を生成する。対称性の認識とインペインティングが候補の質を高める。強化学習が目標に

向けて候補を誘導する。これらのツールが一つの流れとして連結されたときに真価を発揮する。この流れを逆設計パイプライン（Pipeline）と呼ぶ。パイプラインとは複数の工程をパイプのように連結するという意味である。

実務における逆設計は、概ね3つの段階を経て進められる。まず生成段階において、人工知能が目標とする性質に適合する候補構造を描き出す。次に計算検証段階において、DFTと機械学習原子間ポテンシャル（MLIP）が安定性と物性を計算する。最後に実験合成段階において、自律実験室や研究者が実際に作製して確認する。

これら3つの段階は一方のみに流れるわけではない。実験で得られた結果を再び生成モデルへとフィードバックする。モデルはこのフィードバックをもとに、次の候補をより適切に描き出す。このようにフィードバックが循環する方式を能動学習（Active Learning）と呼ぶ。2025年に発表されたある研究は、能動学習によって逆設計の効率を大幅に向上させた。候補の生成と検証を繰り返すことで目標の性質へと接近した。

第2段階である計算検証についてももう少し詳しく見る。生成モデルが作成した候補は、まだ机上の設計図にすぎない。この構造が本当に安定しているかを計算によって検証する。DFTは高精度であるが計算速度が遅い。そこで前章で扱った機械学習原子間ポテンシャルを併用する。この手法はDFTに迫る精度をはるかに高速に発揮する。無数の候補を迅速にスクリーニングする。その中から有望な少数の候補のみをDFTで再確認する。

この協調関係が探索の速度を決定づける。生成がいくら高速であっても検証が遅ければ役に立たない。検証がボトルネックになれば候補が蓄積されるだけである。高速な生成と高速な検証が連動しなければならない。そのため最新の研究では、3つの段階を1つの自動化されたフローとして連結している。次章で扱う自律実験室がこのフローの最終段階を担う。

6.1 全固体電池のためのハライド固体電解質設計

最初の事例はバッテリーの固体電解質設計である。なぜこの材料が重要であるのか、AIがどのように支援するのかを考察する。検証された数値を軸に検討する。

全固体電池（All-Solid-State Battery）は固体電解質を用いる電池である。通常の電池は電解質が液体である。液体電解質は引火の危険性がある。固体電解質はこの危険性を減らす。ただし固体だからといって常に安全なわけではない。リチウム金属や水分、電極と反応することもある。硫化物系や一部のハロゲン化物系は有害な分解物を発生させたり、界面で抵抗や亀裂が生じたりする。それでも液漏れや発火の危険性を低減する利点が大きいため、高い関心を集めている。

固体電解質に求められる性質は厳しい。リチウムイオンが固体内部を速やかに通過しなければならない。イオンがどれほどスムーズに移動するかをイオン伝導度（Ionic Conductivity）と呼ぶ。値が高いほど優れている。同時に高い電圧に耐えなければならない。脆すぎず、良好に密着しなければならない。これらすべての条件を満たすことは困難である。

ハロゲン化物系固体電解質（Halide Solid Electrolyte）が有望な候補として挙げられる。ハロゲン化物とは塩素、臭素、ヨウ素といった元素を指す。この系列は高電圧において比較的安定している。柔軟性と伝導度のバランスも良好である。そのため研究が活発に行われている。代表的な物質として、リチウム、イットリウム、塩素からなる化合物がある。

人工知能はこのような材料設計をさまざまな方法で支援する。2025年に発表されたある研究は、機械学習とDFT計算を組み合わせた。複数の物性を一度に予測することで、優れたハロゲン化物候補を絞り込んだ。イオン伝導度、弾性率、電気化学的安定性ウィンドウを同時に予測した。このように複数の物性を同時に評価するアプローチが実用性を高めた。

2026年に発表された別の研究では、データから規則性を抽出する手法が用いられた。イオン伝導度を左右する重要な化学的特徴を見出した。この特徴をもとに新たな組成を設計した。論文では、設計されたある物質が室温で約12ミリジーメンズ毎センチメートルのイオン伝導度を示したと報告された。この値はこの系列において高い水準である。データから規則性を抽出し、設計へとつなげる流れを示している。

イオンが固体内部をどのように移動するかを計算することは難しい。リチウムイオンはサイトからサイトへとホッピングして移動する。このホッピングの障壁が低いほど伝導度が高くなる。この障壁を計算するには、原子の動きを長時間追跡しなければならない。ここでも機械学習原子間ポテンシャル（MLIP）が用いられる。2025年の研究では、この手法が固体イオン伝導体の計算に有効であると報告された。生成によって候補を提案し、この手法でイオンの移動を確認する。

航空宇宙やロケットにおいてこの材料が持つ意義を考察する。人工衛星や探査機はバッテリーに大きく依存している。太陽光が得られない時間帯は、蓄えた電力で稼働し続ける。バッテリーが不安定であればミッション全体が揺らぐ。安全で軽量な全固体電池はこのリスクを軽減する。AI逆設計は、こうしたバッテリー材料をより迅速に見つける手助けをする。

6.2 水を分解する触媒を探索する設計

次の事例は触媒設計である。触媒とは何か、AIがどのように優れた触媒を探索するのかを見る。ロボット実験室と連携した最新の事例を検討する。

触媒（Catalyst）は化学反応を促進する物質である。自身はほとんど変化しない。その上で反応速度だけを高める。水から水素と酸素を生成する装置には触媒が不可欠である。この装置を水電解装置と呼ぶ。優れた触媒があれば、同じ電力でより多くの水素を得ることができる。

触媒の性能は表面の原子配列に左右される。反応は触媒表面で生じる。反応物質が表面に付着し、脱離しながら変化する。物質が表面に付着することを吸着（Adsorption）と呼ぶ。吸着が強すぎても問題となる。容易に離れず反応が滞るためである。弱すぎても問題となる。反応が起きる前に離れてしまうためである。優れた触媒は適切な強さで保持する。

吸着の強さは表面原子の配列が決める。原子間の距離がわずかに異なるだけでも強さが変化する。そのため表面をどのように構成するかが重要である。人工知能は表面の原子位置を変えながら吸着強度を調整する。反応中間体を適切に捕捉する配列を探索する。この配列こそが優れた触媒の秘訣である。

酸素を生成する反応は困難を伴う。この反応を酸素発生反応（Oxygen Evolution Reaction）と呼ぶ。この反応を起こすには、理論上必要な電圧よりも高い電圧を印加しなければならない。その余分な電圧を過電圧（Overpotential）と呼ぶ。過電圧は反応速度の障壁である活性化エネルギーとは異なる概念である。過電圧が低いほど優れた触媒である。過電圧が低いことは、消費電力が少ないことを意味する。そのため過電圧を下げるのが触媒設計における大きな目標となる。

2026年に発表されたある研究では、生成AIによって触媒の逆設計が行われた。この研究は複数の元素を混合したハイエントロピー触媒（High-Entropy Catalyst）を対象とした。分光情報、生成モデル、ロボット実験装置を統合した。ロボットが候補を作製して性能を測定し、その結果をモデルにフィードバックした。このフィードバックループを高速で回した。

この研究が報告した数値は実用性を示している。1つの試料を作製して測定するのに要していた時間を大幅に短縮した。約20時間かかっていた作業を78分に短縮した。さらに、見出された最良の候補の過電圧を32ミリボルト低減させた。この事例は学術研究でありながら、ロボットによる自動化の有効性をも示している。生成モデルと実験が連携した際に、開発速度がどれほど向上するかを物語っている。

この潮流は人間の役割を変化させる。従来は研究者が1日中かけて1つの試料を作製していた。現在ではロボットがその作業を昼夜問わず行う。人間はどのような目標を設定すべきかを熟考する。どの結果に意義があるかを判断する。手を動かす作業から思考を巡らせる作業へと移行していく。人間の居場所が失われるのではなく、より高次の役割へと移行するのである。次章でこの自律実験室について詳しく扱う。

複数の元素を混合したハイエントロピー触媒が注目を集めるのには理由がある。複数の元素を混合すると、表面に多様なサイトが形成される。その中に反応に適したサイトが現れる確率が高まる。しかし組み合わせの数が膨大であり、人間がすべてを実験することは困難である。生成モデルがこの広大な探索空間を代わりに網羅

する。有望な組成を絞り込み、実験回数を削減する。ロボットがその候補を迅速に作製して検証する。

ロケットや宇宙探査において触媒が持つ意義を考察する。長期にわたる宇宙ミッションでは、水や空気を自給自足しなければならない。水を分解して酸素を得るために触媒が用いられる。燃料を製造する際にも触媒が使われる。優れた触媒は同じ電力でより多くの酸素と燃料を生成する。その分、宇宙船が搭載するペイロードを軽量化できる。AI逆設計は、こうした触媒の実用化を早める。

水素はロケット燃料としても用いられる。液体水素は高い推進力を生み出す。水を分解して水素を得る技術が発展すれば、燃料の生産が容易になる。この際にも触媒が反応の鍵を握る。安価な元素で優れた触媒を作製できればコストを削減できる。希少な白金の含有量を減らす方向性が目標である。生成AIは、このような非貴金属触媒の探索において真価を発揮する。

6.3 航空宇宙用合金と超合金の逆設計

最後の事例はロケットエンジン用合金の設計である。なぜ新たな合金が必要とされるのかを見る。生成モデルがどのように合金組成を探索するのかを検討する。検証済みの最新研究を根拠とする。

ロケットエンジンは極限の熱に耐えなければならない。燃焼室の内部は数千度という高温になる。ノズルは高速のガスによって摩耗する。長年にわたりニッケル基超合金（Superalloy）がこの役割を担ってきた。超合金は高温下でも強度を維持する合金である。しかしニッケル基超合金にも温度限界が存在する。より高温の環境では溶解したり強度が低下したりする。

その代替案としてハイレントロピー合金（High-Entropy Alloy）が浮上した。通常の合金は主要な1つの元素に微量成分を添加する。ハイレントロピー合金は複数の元素をほぼ等しい割合で混合する。このように混合すると、構造が思いがけず安定化する。その中で融点が高い元素から作られたものを耐火性ハイレントロピー合金（Refractory HEA）と呼ぶ。この合金は1100度を超える環境においてニッケル基超合金に代わる候補として注目されている。

ハイレントロピー合金が安定している理由は無秩序性にある。複数の元素が均一に混ざり合うと、配列の組み合わせ数が増える。この多数の組み合わせが構造を安定に保つ。この性質を高配置無秩序と呼ぶ。無秩序がむしろ秩序を維持する役割を果たすのである。こうした性質のおかげで極限環境下でも優れた耐久性を示す。ロケットノズルや燃焼室は、このような耐性を要求する代表的な部位である。

問題は、組み合わせの数が再び天文学的に膨大である点にある。元素をわずか5種類混合するだけでも、組成比の組み合わせは無数に存在する。1つずつ作製して実験を行うことは困難である。ここで生成モデルの出番となる。目標とする物性を設定すれば、それに適した組成を逆算して探索する。強度や靱性の値を条件として与える。モデルはその値を達成し得る元素比率を提案する。

2026年に発表された複数の研究がこの方向性を示している。ある研究では、合金組成を生成するさまざまな手法が整理された。変分オートエンコーダ、敵対的生成ネットワーク、拡散モデルが網羅的に検討された。別の研究では、文献やデータを収集して高温ハイレントロピー超合金の候補を絞り込むプロセスが示された。目標物性に合致する組成を選定し、試験すべき候補数を削減した。いずれの研究も実際の部品を製造する段階ではなく、候補を絞り込む段階にある。

合金は組成だけで性質が決まるわけではない。同一の組成であっても製造プロセスによって変化する。どのように加熱し冷却するかが微細構造を変化させる。微細構造とは結晶粒のサイズや配列のことである。したがって合金設計においては、組成とプロセスの双方を考慮しなければならない。生成モデルもこの両方を統合して扱う方向へと進んでいる。以降の章でこのプロセスに関する議論をさらに深める。

ただし注意すべき点がある。耐火性ハイレントロピー合金には未だ克服すべき課題が存在する。室温で脆く割れやすい性質が残っている。高温下で酸素と反応し表面が劣化することもある。そのため、実験室レベルの期待と実際の部品適用との間には依然として隔りがある。生成モデルが候補を絞り込んだとしても、これら2つの障壁は実験によって克服されなければならない。室温脆性と高温酸化を制御することが今後の課題である。

6.4 生成モデルの比較と検証の重要性

多様な生成モデルはどのように比較すべきか。どのような指標で評価するのかを見る。検証がなぜ結果以上に重要であるのかを検討する。未検証の数値に注意を払うべき理由についても明らかにする。

生成モデルを比較する際には、複数の基準を総合的に評価する。1つは安定性であり、生成された結晶が自律的に構造を維持できるかを見る。新規性も評価する。データベースに存在しなかった物質であるかを精査する。原子間距離の妥当性も測定する。原子同士が過度に近接していないかを確認する。対称性の保持も検討する。結晶の対称性が保たれているかを検証する。最後は生成速度であり、1つの候補を生成するのに要する時間を併せて測定する。

単一の指標だけが優れていても優れたモデルとは言えない。生成速度が速くても安定性が低ければ実用価値は乏しい。対称性を厳密に保持していても新規性がなければ意義は薄れる。そのため複数の指標のバランスを評価する。課題に応じて重視される指標は異なる。バッテリー材料であれば安定性と伝導度が優先される。迅速なスクリーニングが求められる場合は生成速度が優先される。

公平に比較を行うためには、同一のテストセットを用いなければならない。結晶生成分野には広く用いられているベンチマークテストセットが存在する。MP-20がその代表例である。Materials Projectから抽出された約2万個の結晶データセットである。ペロブスカイト結晶のみを集めたデータセットもある。すべてのモデルを同一のセットでテストする。そうして初めて、どのモデルが優れているかを比較することができる。テストセットが異なれば、スコアを並べて比較することはできない。

ここで注意すべき点がある。複数のモデルの性能を並列して記載した数値は、原典で確認できないケースが多い。そのため本書では検証されていない表の数値は採用しない。確認されていない数値は誤った判断を招くためである。

代わりに、検証済みの結果の1つから全体像を把握する。マイクロソフトが2025年に『Nature』に発表した生成モデルの研究である。このモデルの名称はMatterGen（マタージェン）である。このモデルは元素周期表全体にわたる無機物質を生成する。目標とする物性に応じた微調整（ファインチューニング）も可能である。論文では、このモデルによる生成物が従来モデルよりも2倍高い頻度で安定かつ新規であると報告された。エネルギー極小点にも10倍近く到達しやすいと報告されている。

このモデルは多様な条件に合わせて再学習させることができる。弾性率に合わせて学習させれば高硬度の物質を生成する。磁気特性に合わせて学習させれば磁性材料を生成する。特定の元素のみを使用するように学習させることもできる。単一の基盤モデルを多様な目標に合わせて調整する手法である。この手法をファインチューニング（Fine-tuning）と呼ぶ。基盤モデルを一から再構築することなく、目標のみを付け替えるのである。

この研究は実験検証まで進んだ。目標体積弾性率を200ギガパスカルに設定して新物質の構造を生成した。この物質を実際に合成した。ただし、合成されたものは原子が無秩序に混ざり合った固溶体であった。研究陣はナノインデンテーションでヤング率を測定し、計算で得られた値を用いて体積弾性率を推定した。このようにして得られた推定値は、4回のうち最大169ギガパスカル、平均は 158 ± 11 ギガパスカルであった。実測値と換算値、計算上の構造と合成した構造を区別して読む必要がある。それでも、生成から合成までつながった稀な実証である。

プレプリントを扱う際は、より慎重でなければならない。本章で紹介した多くのモデルはプレプリント段階である。プレプリントは査読を経る前のものである。結果が後から変わる可能性がある。そのため本書は、プレプリントを初期研究であることを明示して紹介する。優れた数値であっても検証前には確定事項として扱わない。この姿勢が読者を誤った確信から守る。

検証がなぜ結果よりも重要であるのかを確認する。生成モデルは候補を無限に生み出す。しかし、作ったからといってすべてが本物であるわけではない。計算で選別しなければならない。実験で確認しなければならない。材料逆設計は、生成と計算と実験が共に回ってこそ意味がある。航空宇宙用材料のように安全が関わる分野ほど、この原則はより厳格でなければならない。計算による検証と実験による合成を経て初めて、候補を信頼

できる。

まとめ

本章は、材料探索の方向を逆転させる話であった。従来の方法は材料を先に選び、性質を後から測定した。新しい方法は性質を先に決定し、材料を後から描く。この新しい方法を材料逆設計と呼ぶ。方向を一つ変えただけであるが、探索の威力は大きく変わる。存在しなかった物質を描き出す道が開かれる。

逆設計の主役は生成AIである。拡散モデルはぼやけた原子の集まりからノイズを除去しながら結晶を形作る。画像生成AIと原理が似ている。結晶生成はより難しい。格子と原子位置、そして原子の種類を同時に整合させなければならないためである。

結晶には対称性という厳格な規則がある。3次元結晶は230種類の空間群のいずれかに属する。初期モデルであるCDVAEは対称性を直接固定できず、構造が崩れがちであった。対称性を考慮した条件付き拡散モデルは、小さなシード（種）を生成し、対称性によって展開することでこの問題を軽減した。名称が似ている研究を混同せず、区別して捉える姿勢が重要である。

速度を高めようとする試みも続いた。フローマッチングはノイズを少しずつ除去する代わりに近道を学習する。FlowMMとCrystalFlowが代表事例である。曲がった空間上で測地線に沿って結晶を素早く生成する。候補を多く抽出すべき材料探索において、この速度が大いに活用される。

一部のみを変更する技術も発展した。インペインティングは空孔や欠陥を埋める。ミラージュ原子拡散は原子数を自由に扱う。存在するかもしれないし存在しないかもしれない仮想的なサイトを設け、数を自ら決定する。実際の材料の欠陥構造をより適切に表現する。

強化学習は生成モデルを優れた候補へと導く。安定性、新規性、合成可能性を報酬に組み込む。KL正則化と経験再生が探索を安定に保つ。SUN比率とハル上エネルギーで成果を測る。

実務事例は、この技術が机上の空論ではないことを示している。ハライド固体電解質の設計では、データ分析と設計が一貫してつながった。ハイエントロピー触媒の設計では、ロボット実験と生成モデルが連動して時間を大幅に短縮した。マイクロソフトの生成モデルは、設計した物質を実際に合成して性質を確認した。

本章を貫く考えは一つである。人工知能は広大な物質空間を代わりに歩んでくれる案内人である。人間が生涯かけても行けない道をわずか数日で巡る。良さそうな候補を選び出して提示する。しかし、その候補を信頼するかどうかは計算と実験が決める。案内人が道を狭めて絞り込み、人間が最後の扉を開く。

最後に検証の原則を改めて確認する。生成モデルは候補を無限に出力する。しかし、生成したからといってすべてが本物であるわけではない。確認されていない数値は用いない。計算で選別し、実験で確認しなければならない。材料逆設計は、生成と計算と実験が共に回ってこそ意味がある。ロケットや宇宙探査のように安全が関わる分野では、この原則はより厳格でなければならない。AIが描いた構造は最終的な答えではなく、厳選された実験候補である。

関連根拠資料

- Xie, T., Fu, X., Ganea, O. E., Barzilay, R., & Jaakkola, T. (2022). Crystal diffusion variational autoencoder for periodic material generation. International Conference on Learning Representations. <https://arxiv.org/abs/2110.06197>
- Jiao, R., Huang, W., Lin, P., Han, J., Chen, P., Lu, Y., & Liu, Y. (2023). Crystal structure prediction by joint equivariant diffusion. Advances in Neural Information Processing Systems. <https://openreview.net/forum?id=DNdN26m2Jk>
- Merchant, A., Batzner, S., Schoenholz, S. S., Aykol, M., Cheon, G., & Cubuk, E. D. (2023). Scaling deep learning for materials discovery. Nature, 624, 80-85. <https://doi.org/10.1038/s41586-023-06735-9>
- Zeni, C., Pinsler, R., Zugner, D., Fowler, A., Horton, M., Fu, X., et al. (2025). A generative model for inorganic materials design. Nature, 639, 624-632. <https://doi.org/10.1038/s41586-025-08628-5>
- Levy, D., Panigrahi, S. S., Kaba, S. O., Zhu, Q., Lee, K. L. K., Galkin, M., Miret, S., & Ravanbakhsh, S. (2025). SymmCD: Symmetry-preserving crystal generation with diffusion models. International Conference on Learning Representations. <https://arxiv.org/abs/2502.03638>

- Ishii, T., Hisama, K., & Shinohara, K. (2026). Symmetry-aware conditional generation of crystal structures using diffusion models. arXiv. <https://arxiv.org/abs/2601.08115>
- Okhotin, A., Nakhodnov, M., Kazeev, N., Lazarev, M., Ustyuzhanin, A. E., & Vetrov, D. (2025). MiAD: Mirage atom diffusion for de novo crystal generation. arXiv. <https://arxiv.org/abs/2511.14426>
- Chen, J., Guo, J., Fako, E., & Schwaller, P. (2025). Accelerating inverse materials design using generative diffusion models with reinforcement learning. arXiv. <https://arxiv.org/abs/2511.03112>
- Miller, B. K., Chen, R. T. Q., Sriram, A., & Wood, B. M. (2024). FlowMM: Generating materials with Riemannian flow matching. *Proceedings of Machine Learning Research*, 235. <https://arxiv.org/abs/2406.04713>
- Luo, X., Wang, Z., Wang, Q., Shao, X., Lv, J., Wang, L., Wang, Y., & Ma, Y. (2025). CrystalFlow: A flow-based generative model for crystalline materials. *Nature Communications*, 16, 9267. <https://doi.org/10.1038/s41467-025-64364-4>
- Lo, A., Mucko, L., Cheng, A. H., Cai, A., Price, A. J. A., & Matusik, W. (2026). Fast organic crystal structure prediction with unit cell flow matching. arXiv. <https://arxiv.org/abs/2606.03199>
- Lipman, Y., Chen, R. T. Q., Ben-Hamu, H., Nicklas, M., & Le, M. (2022). Flow matching for generative modeling. *International Conference on Learning Representations*. <https://openreview.net/forum?id=PqvMRDCJT9t>
- Hoogeboom, E., Satorras, V. G., Vignac, C., & Welling, M. (2022). Equivariant diffusion for molecule generation in 3D. *International Conference on Machine Learning*, 8867-8887. <https://arxiv.org/abs/2203.17003>
- Schulman, J., Wolski, F., Dhariwal, P., Radford, A., & Klimov, O. (2017). Proximal policy optimization algorithms. arXiv. <https://arxiv.org/abs/1707.06347>
- Metni, H., Ruple, L., Walters, L. N., Torresi, L., Teufel, J., Schopmans, H., Ceder, G., & Friederich, P. (2026). Generative models for crystalline materials. *Advanced Materials*, 38(18), e23620. <https://doi.org/10.1002/adma.202523620>
- Mal, S., Ahmed, N., Jami, J., Mishra, S., & Sen, P. (2025). DiffCrysGen: A generative diffusion model for accelerated design of inorganic crystalline materials. arXiv:2510.12329. <https://arxiv.org/abs/2510.12329>
- Okuda, I., Takahara, I., & Mizoguchi, T. (2026). Inverse materials design via joint generation of crystal structures and local electronic descriptors. arXiv:2605.01286. <https://arxiv.org/abs/2605.01286>
- Yang, K., & Schwalbe-Koda, D. (2025). A generative diffusion model for amorphous materials. *npj Computational Materials*, 12(1), 29. <https://doi.org/10.1038/s41524-025-01901-1>
- Han, X.-Q., Guo, P.-J., Gao, Z.-F., Sun, H., & Lu, Z.-Y. (2025). InvDesFlow-AL: Active learning-based workflow for inverse design of functional materials. *npj Computational Materials*, 11(1), 364. <https://doi.org/10.1038/s41524-025-01830-z>
- Cheng, M., Luo, W., Tang, H., Yu, B., Cheng, Y., Xie, W., Li, J., Kulik, H. J., & Li, M. (2026). Enhancing materials discovery with valence-constrained design in generative modeling. *Nature Computational Science*. <https://doi.org/10.1038/s43588-026-01037-2>
- Choong, L. Y. A., Chen, Z., & Ng, M.-F. (2025). Discovery of effective halide solid electrolytes for solid-state rechargeable batteries via machine learning and DFT calculations. *ACS Applied Energy Materials*, 9(1), 507-520. <https://doi.org/10.1021/acsaem.5c03277>
- Li, D., Lin, Z., Luo, F., Xiao, C., Dai, Z., Ye, Z., Wang, Q., Guo, Y.-G., & Yang, C. (2026). Data-driven chemical feature extraction and material design for halide solid-state electrolytes. *eScience*, 100590. <https://doi.org/10.1016/j.esci.2026.100590>
- Zhou, D., Yang, R., Jia, Z., Cai, Y., Zhao, L., Guo, L., Ye, G., Wang, S., Chen, L., Liu, D., Smith, P. E. S., Huang, Y., Zhu, Q., & Jiang, J. (2026). A practical inverse design approach for high-entropy catalysts using generative AI. *Nature Synthesis*, 5(5), 730-739. <https://doi.org/10.1038/s44160-025-00983-5>
- Li, C., Xian, Y., Zhou, Y., Ding, X., Sun, J., & Xue, D. (2026). Generative design for alloys: Harnessing generative models for faster discovery. *Advanced Materials*, 38(29), e20478. <https://doi.org/10.1002/adma.202520478>
- Rousseau, F., Belmonte, T., Sur, F., & Nominé, A. (2026). Inverse design of high-entropy superalloys using machine learning and generative artificial intelligence. *Materials & Design*, 266, 116097. <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2026.116097>
- Du, H., Hui, J., Zhang, L., & Wang, H. (2025). Universal machine learning interatomic potentials are ready for solid ion conductors. arXiv:2502.09970. <https://arxiv.org/abs/2502.09970>

第3章 自律実験室と科学的マルチエージェントシステム

はじめに

家でパンを焼く場面を思い浮かべてみる。小麦粉と水の量を決める。生地を混ぜてオーブンの温度を合わせる。焼き上がったパンを切って味を見る。硬すぎれば水を増やし、温度を下げる。次回には少し良いパンができる。このように材料を決め、作り、味わい、直す作業を何度も繰り返す。

新しい材料を探す研究もこれと似ている。研究者は成分比率を決める。粉末を混ぜ、高温で焼く。作られた物質の構造と性質を測定する。結果が悪ければ条件を変える。この過程を数百回繰り返して初めて、優れた材料が見つかる。

問題は時間である。人が手作業でこの作業を行えば、1日に数回しかできない。夜には実験が止まる。成分を少しずつ変えながら広い範囲を探索するには数年がかかる。ロケットに用いる材料は耐えなければならない条件が厳しい。そのため候補物質の数が非常に多く、人の手だけではすべてを試験することが難しい。

自律実験室 (Self-Driving Laboratory) は、この繰り返しを機械に委ねる研究室である。人工知能 (AI) が次に試験する条件を選ぶ。ロボットが粉末を計量し、混ぜ、焼く。分析機器が結果を測定する。その結果が再び人工知能へとフィードバックされる。人が毎回指示を出さなくても、実験が自律的に続く。まるで一人で掃除するロボット掃除機のように、実験室が一晩中自律的に稼働する。

このように結果が再び次の選択へと戻る構造を閉ループ (Closed-loop) と呼ぶ。閉ループとは輪のように閉じた回路という意味である。実験、測定、学習、次の実験が途切れることなく循環する。本章では、この自律実験室がどのように動作するかを扱う。人工知能がどのように次の実験を選ぶかを考察する。論文の中の文章を機械がどのように読み取るかを見る。ロボットと人工知能がどのように安全に対話するかを調べる。最後に世界各地の実際の自律実験室の事例を見る。

自律実験室がなぜ今注目されているのかについても触れておく。最近の人工知能は材料の性質を素早く予測する。計算によって有望な候補を1日に数千個も導き出す。しかし、実際に作って確認する速度は遅い。予測は速くなったが、検証が追いつかない。このギャップを埋めるのが自律実験室である。計算が導き出した候補をロボットが迅速に作製して確認する。予測と検証の速度を合わせる架け橋となるわけである。

本章で登場する多様なシステムは、まだ初期研究段階のものが多い。学会で発表されたばかりのプレプリントもある。プレプリントとは査読を経ていない初期研究のことである。そのため本章では、性能の数値を誇示するよりも原理と限界を共に見る。自律実験室の目標は、迅速な実験ではなく信頼できる実験である。

3.1 自律実験室はどのような構成要素で動作するか

本節で扱うこと

本節では、自律実験室全体がどのような構成要素から成り立っているかを見る。大きく分けて4つの部分がある。次の実験を決定する「頭脳」、実際に作製する「手」、結果を測定する「目」、学んだことを更新する「記憶」である。この4つの部分が輪のように結ばれ、実験結果を次の実験へと引き渡しながら循環する。

まず閉ループという言葉の意味を改めて確認する。次に各部分が担う役割を一つずつ見ていく。最後に、この構造がロケット材料研究になぜ必要なのかを考察する。

自律実験室は4つの部分が噛み合って動作する。計画層では、人工知能が次に試験する成分とプロセス条件を選択する。ここでプロセス条件とは、焼成温度、保持時間、加熱速度、雰囲気ガスを指す。実行層では、ロボットが粉末を計量し、混合し、加圧成形してペレットにする。そして電気炉に入れて焼成する。測定層では、X線回折装置のような機器が作製された物質の構造を測定する。学習層では、測定結果が人工知能モデルに入力され、知識が更新される。

この4つの部分をつなぐのが情報の流れである。計画層は実行層に作業仕様書を送る。作業仕様書とは、何を、どれだけ、どのように行うかを記した指示書である。実行層は作製した試料を測定層へと送る。測定層は相純度や格子定数などの値を学習層へ送る。相純度とは、目的とする結晶がどれだけ純粋に生成されたかを意味する。学習層はその値を用いて次の計画を練り直す。このように情報が一周することで、1回の実験が完了する。

閉ループの強みは迅速な繰り返しにある。1回の実験が失敗してもデータは残る。失敗した条件も、何がうまくいかないのかを教えてくれる。人工知能は成功と失敗の双方から学習する。そのため、次の条件が少しずつ改善されていく。人間は数日に1度大きな方向性を確認するだけで、細かな繰り返しは機械が引き受ける。

なぜロケット材料にこの構造が必要なのかを見ていく。ロケットのノズルや燃焼室は極限条件に耐える。温度は数千度まで上昇する。圧力や振動も大きい。このような環境に用いる材料は条件が極めて厳しい。成分をわずかに変えるだけでも性質が大きく変化する。そのため試験すべき候補が数万種類に及ぶ。人の手ではこの広大な空間をすべて探索することはできない。自律実験室はこの広大な空間を迅速に絞り込むことができる。

2026年には自律実験室をさらに一段上の水準へと引き上げようとする研究が続いた。英国王立化学会は「自律実験室2.0」という概念を整理した。第1世代の自律実験室は、決められた1つの課題のみを解決した。次世代は多様な種類の機器と課題を柔軟に扱おうとしている。自律実験室を幅広く考察した2025年の総説論文も発表された。この論文は技術の成熟度と依然として残る障壁を併せて指摘している。アメリカ化学会のメディアは、自律実験室が化学者の働き方を変えつつあると伝えている。

この構造には限界も明白に存在する。設備を整えるのに多額の費用がかかる。ロボットと分析機器を統合・接続することも容易ではない。粉末を正確に計量することすら簡単ではない。失敗した実験を自動的に検知することも難しい。そのため現在の自律実験室は特定の材料群にのみ適している。あらゆる材料を網羅して扱える万能の実験室はまだ存在しない。本章の残りの節では、こうした障壁を一つずつどのように克服していくかを見ていく。

3.1.1 次の実験を選択するベイズ能動学習

本小節では、自律実験室の頭脳に相当する部分を扱う。人工知能が次の実験をどのように選ぶかが中核である。ここで用いられる手法がベイズ能動学習である。この手法がどのようなものであり、なぜ実験回数を減らせるのかを平易な言葉で解説する。

仮説とは、次の実験がなぜ有効であるかについての考えである。優れた自律実験室は優れた仮説を立てる。やみくもにいかなる条件も試験しては時間が浪費される。見込みのある領域を選んで試験しなければならない。ベイズ能動学習（Bayesian Active Learning）は、この選択を支援する手法である。能動学習とは、機械が学習するデータを自ら選択する方式を意味する。

この手法では、まずサロゲートモデル（Surrogate Model）を構築する。サロゲートモデルとは、高コストな実験を代行して模倣する小規模な計算モデルである。これまでに得られた実験結果を用いてこのモデルを構築する。サロゲートモデルは、まだ試験していない条件における性質を予測する。予測には2つの値が共に出力される。1つは予想される性能である。もう1つは、その予測がどれほど不確実であるかである。

この2つの値を併せて見るのが要点である。予想性能が高い場所は試験する価値がある。不確実性が大きい場所も試験する価値がある。よく分からない場所に、思いがけない優れた材料が隠れている可能性があるからである。性能だけを追求すれば、すでに知っている領域にとどまることになる。不確実性だけを追求すれば、役に立たない領域をさまようことになる。優れた手法は2つのバランスを取る。これを探索と活用のバランスと呼ぶ。ここで探索とは未知の場所を調べることであり、活用とは既知の場所を深掘りすることである。

このバランスを数値として測定するのが獲得関数（Acquisition Function）である。獲得関数は各候補条件にスコアを付ける。スコアが高い順に並べると、最上位に来る場所が次の実験対象となる。代表的な獲得関数として期待改善度（Expected Improvement）がある。期待改善度は、次の実験がこれまでの最高結果からどれほど改善されるかを測定する。別の手法として上限信頼限界（Upper Confidence Bound）がある。この手法は高い性能と未知の領域を同時に考慮させる。自律実験室はこのようなスコアによって次の成分、温度、時間を

決定する。

ロケット材料においてこの手法がなぜ重要であるかを見ていく。超高温セラミックスや特殊合金は、1回の実験に多大なコストがかかる。高価な原料を用い、長時間の焼成を行う。そのため、実験回数を減らすことがそのまま費用と時間の節約につながる。ベイズ能動学習は見込みのある条件のみを選んで試験する。やみくもにすべてを試験する場合に比べて実験回数が大幅に削減される。ある自律実験室では、必要な実験回数を数十倍削減したと報告されている。

実際の事例にその効果が表れている。2026年、ある研究チームは薄膜を自律的に成長させる実験室を構築した。薄膜は原子を1層ずつ積み重ねて作製する。この実験室は電子回折パターンをリアルタイムカメラで読み取った。回折パターンは原子が適切に積層されているかを知らせる信号である。人工知能はこのパターンを見ながら次の条件を選択した。その結果、必要な実験回数が大幅に減少した。条件を一つずつ網羅的に探索する場合に比べて30倍以上削減されたと発表した。優れた条件をはるかに迅速に見つけ出したのである。この研究も初期段階にあるが、今後の方向性を明確に示している。

2026年には、この手法を自律実験室に合わせて改良する研究が活発に行われた。あるプレプリントは自律材料実験室のためのベイズ最適化を整理した。アルゴリズムから実際の実験フローに至るまで体系的に説明している。別のプレプリントは探索空間を自律的に絞り込む手法を提案した。能動学習によって候補空間を半分程度に削減しながらも、優れた解の大部分を維持した。このようにすれば、優れた材料により迅速に到達できる。実験科学のためのベイズ最適化の実践ガイドも2026年に発表された。

この手法にも限界がある。サロゲートモデルは初期段階ではデータが少ないため予測が大まかである。最初の数回の実験では方向性を見誤る可能性がある。成分空間が極めて広い場合、計算量が膨大になる。測定にノイズが多いと予測が不安定になる。そのため人間はサロゲートモデルの予測を盲信することはない。予測を参考にしつつも、実際の測定によって常に検証する。自律実験室においても人間の監督は依然として不可欠である。

3.2 論文中の合成法を抽出し安全な計画へと変換する

本節で扱うこと

本節では2つの事項を扱う。1つは、論文中の合成方法を機械が読み取れるようにすることである。もう1つは、その方法をロボットが安全に実行できるよう計画に変換することである。

人間は論文を読んで実験手順を頭の中で思い描く。機械はそれができない。そのため、文章を機械が扱える形式に変換しなければならない。本節ではその変換プロセスと安全計画について考察する。

論文には合成方法が文章で記述されている。どの粉末をどれだけ混ぜるかが書かれている。何百度で何時間焼成するかが書かれている。どのような気体環境下で処理するかが書かれている。数十年間にわたり蓄積された論文には、このような手法が数百万件含まれている。この知識は新材料研究における大きな基盤である。しかし、その大半は人間向けの自然言語として散在している。

問題は、この文章の表現が執筆者によって異なる点である。ある論文には一晩中焼いたと書かれている。ある論文には高温で処理したとだけ書かれている。一晩が何時間なのか、高温が何度なのかは正確に書かれていない。人間は経験によってこの空白を補う。機械はそれができない。そのため、散在する文章を正確な数値へと変換する作業が必要となる。

ロケット材料研究において、この作業は極めて価値が高い。超高温セラミックスや特殊合金の合成法は古い論文に散在している。人間がこれらをすべて読み通して整理するには長い時間がかかる。機械が文章を自動的に抽出して整理すれば、時間を大幅に節約できる。自律実験室は、このように集めた手法を直ちにロボットへの指示へと変換し、論文から実験までの距離を縮める。

この知識が散在していると、重複研究が生じる。他の研究者がすでに失敗した条件を再び試験してしまう。すでに成功した手法を知らずに最初から探し直すことになる。論文中の手法を一箇所に集約すれば、このような

無駄を減らすことができる。人間が数百万本もの論文をすべて読むことは困難である。そのため、機械が文章を抽出して整理する作業は価値がある。適切に整理された手法は、自律実験室の優れた出発点となる。

ここには2つの段階がある。1つは文章から手法を抽出することである。この役割を大規模言語モデル (Large Language Model) が担う。大規模言語モデルとは、人間の文章を学習して処理する人工知能である。もう1つは抽出した手法を安全な計画へと変換することである。この役割を計画言語が担う。次の2つの小節で各段階を詳しく見ていく。

3.2.1 論文から合成計画を立案する言語モデル (MSP-LLM)

この小節は論文から合成方法を抽出する方法を扱う。代表事例としてMSP-LLM研究を検討する。この研究がどのような問題を解こうとしているのか、どのような段階で動くのかを見る。

MSP-LLMは材料合成計画を立てる大規模言語モデルの研究だ。名前は完全な材料合成計画のための統合大規模言語モデルフレームワークというタイトルに由来する。2026年に公開された初期研究だ。研究陣はノ・ヒウン、ナ・ギョンス、イ・ナムギョン、パク・チャンヨンだ。この研究は学会で発表されたプレプリントである。そのため現場標準ではなく先駆的な試みとみる。

この研究が解く問題は合成計画だ。合成計画は目標材料を作る全手順を立てる作業だ。この作業は二つの小さな問題に分かれる。一つは前駆体予測だ。前駆体は目標材料を作るために最初に投入する原料だ。もう一つは合成操作予測だ。合成操作は混ぜて、焼いて、冷ます行動の順序だ。二つの問題を一緒に解いてこそ完全な計画が得られる。

MSP-LLMはこの二つの問題を一つの流れにつなぐ。まず目標材料がどの種類であるかを定める。この種類が中間判断基準となる。次にその種類に合った前駆体を選ぶ。最後にその前駆体に合った操作順序を組み立てる。このように種類から原料へ、原料から順序へとつながる連鎖を作る。連鎖でつなぐと、化学的に辻褄の合う計画が得られる。

この流れをより分かりやすい例で見る。どのような料理を作るかを決めることが目標材料の種類だ。キムチチゲを作ると決めるようなものだ。次に何をかうかを決めることが前駆体予測だ。キムチと豚肉と豆腐を選ぶようなものだ。最後にどのような順序で調理するかを決めることが操作予測だ。炒めて水を注ぎ、煮込む順序を組み立てるようなものだ。MSP-LLMはこの三つの段階をつなげて計画を完成させる。

ロケット材料において、このような自動計画がなぜ価値があるのかを見る。新しい合金やセラミックスを作るには原料選びからして難しい。同じ目標であっても原料を変えれば結果が変わる。焼成の順序を変えても結果が変わる。人間がこの組み合わせをすべて検討するには長い時間がかかる。自動計画器は論文の知識をもとに優れた出発点を素早く提示する。自律実験室はこの出発点から実験を開始できる。

この方法にも明確な限界がある。大規模言語モデルは存在しない事実を捏造することがある。これをハルシネーションと呼ぶ。でっち上げられた原料や条件のまま実験すると資源が無駄になる。危険な組み合わせを提示することもある。そのため、抽出した計画は必ず人間や他の検証ツールで確認する。化学の規則に合っているか、安全であるかをまず吟味する。自動計画は人間を助けるツールであり、人間を排除するツールではない。

3.2.2 計画言語でロボットの事故を防ぐ (PDDL)

この小節は抽出した合成方法を安全なロボット計画に変換する作業を扱う。ここで用いるツールが計画言語PDDLだ。この言語がどのようにロボットの事故を防ぐのかを分かりやすい言葉で解き明かす。

実験計画は単なる順序表ではない。各行動にはあらかじめ満たすべき条件がある。電気炉が空いていて初めて試料を入れる。電気炉が冷めて初めて試料を取り出す。粉末の計量が終わって初めて混合を行う。このような前後の条件を破ると事故が起きる。熱い電気炉の扉をロボットがむやみに開けると危険だ。

PDDL (Planning Domain Definition Language) は、このような計画を記述する言語だ。日本語で計画領域定義言語という意味だ。この言語は各行動に対して二つの事柄を記述する。一つは前提条件だ。その行動を行う前に何が真でなければならないかを記述する。もう一つは実行効果だ。その行動を行うと何が変わるかを記述

する。例えば、焼成行動の前提条件は電気炉が待機状態であり温度が低いことだ。そして、この行動を終えた時の実行効果は試料が熱処理されることだ。

このように条件を記述すると、機械が安全な順序を自ら見つけ出す。条件に合わない行動は実行されない。熱い電気炉への接近命令は遮断される。計量が終わっていない試料は混合へと進まない。この規則はロボットの事故を未然に防ぐ防護壁となる。人間が守る実験室の安全規則を機械言語に移し替えたようなものだ。

ただし、この防護壁は自動的に安全を保証するわけではない。前提条件は人間が一つひとつ正確に書き込んでこそ機能する。条件を漏らしたり誤って記述したりすると防護壁に穴が開く。そのため、PDDLは安全な実行を保証する装置ではない。人間が危険をあらかじめ予測して規則に落とし込んでおくためのツールだ。規則の緻密さは人間の判断の緻密さに比例するにすぎない。

この計画は図として表すことができる。各行動を点とし、前後の関係を矢印で結ぶ。このような図を有向非巡回グラフと呼ぶ。矢印が一方方向にのみ流れ、元に戻らないという意味だ。この図を見れば、どのような作業を同時に行ってもよいか分かる。例えば、ある試料を焼成している間に別の試料の粉末を計量する。互いに邪魔にならない作業を並行して行えば、実験室全体がそれだけ速く稼働する。

ロケット材料の実験において、この安全計画は価値が高い。超高温電気炉は扱いを誤ると非常に危険だ。反応性の高い原料は空気に触れてはならない。複数の機器が同一の実験室で同時に稼働する。無人で夜通し稼働する実験室では、事故を防ぐ規則が不可欠だ。PDDLのような計画言語は、この規則を緻密に組み立ててくれる。自律実験室の処理速度は、この安全装置の上で初めて意味を持つ。

この方式にも限界がある。世の中のすべての条件を規則として書き尽くすことは難しい。書ききれなかった状況が実際に起こり得る。規則が多すぎると計画を探索する計算量が増大する。予期せぬ故障は規則だけでは防げない。したがって、計画言語だけでは不十分だ。リアルタイムで機器の状態を監視する別の装置が不可欠であり、その装置については次節で扱う。

3.3 人工知能と実験機器をつなぐ標準通信（MCP）

この節は人工知能と実験機器がどのように対話するのかを扱う。言語モデルは文章を扱う。天秤や電気炉、ロボットアームは正確な命令を要求する。この両者の間をつなぐ中間層が必要だ。本節はその中間層を検討する。標準通信プロトコルと、その上に構築される安全装置を併せて見ていく。

言語モデルは人間の文章を巧みに処理する。温度をゆっくり上げよという文章も理解する。しかし、電気炉は文章を理解できない。電気炉は毎分何℃で昇温せよという正確な信号を受け取る必要がある。天秤もロボットアームも同様だ。そのため、文章を機器の言語へと変換する通訳が必要となる。

かつてはこの通訳を機器ごとに個別に作成していた。天秤用の通訳、電気炉用の通訳、ロボット用の通訳をそれぞれ組んだ。機器を一つ変更すれば、通訳も新しく作り直さなければならなかった。多くの実験室が同じ作業を繰り返していた。これは大きな無駄であった。標準が存在しなかったため、互いのコードを共有して再利用することも困難であった。

この問題を解決しようとするのが標準通信プロトコルだ。標準プロトコルがあれば、機器ごとに同一の方式で接続できる。新しい機器もプロトコルに合わせるだけで即座に接続できる。実験室間でコードを共有することも容易になる。近年の自律実験室研究は、この標準をモデルコンテキストプロトコルに見出している。

モデルコンテキストプロトコル（Model Context Protocol）というオープンな規格がある。略してMCPと呼ぶ。プロトコルとは互いに取り決めた通信方式のことだ。MCPは人工知能とソフトウェアツールをつなぐ規格だ。どのようなツールが存在するかを標準的な方法で人工知能に伝える。人工知能はそのツールを自律的に認識して呼び出す。

ここで誤解しやすい点を指摘しておく。MCPはソフトウェア同士をつなぐ上位プロトコルだ。天秤や電気炉のような実機を直接駆動することはできない。モーターやバルブを動かす作業は、機器ごとに個別に存在するドライバが担う。ドライバは機器の信号を直接扱う下位プログラムだ。MCPはこのドライバの上に載り、人工知

能と橋渡しをする。したがって、MCP単体で機器が直接接続されるわけではない。MCPは産業用のリアルタイム制御規格でも安全規格でもない。機器を接続するには、その下層にドライバ層を個別に用意しなければならない。

この規格を自律実験室に導入した事例がNIMOコントローラだ。2026年に公開された初期研究である。研究チームは吉川成樹と田村亮だ。この研究は自律実験室の多様な機能をMCPサーバーとして公開する。ここでNIMOは次の実験を決定する意思決定エンジンである。コントローラはそのエンジンと多様なツールをMCPでつなぐ調整層だ。この事例において人工知能は調色を行う自律実験室を扱った。目標の色が得られるまで成分を自律的に変更しながら実験を行った。この研究が実際に示したのは、この調整と調色実験である。

この研究が明かすNIMOの目的は明確だ。自律実験室には多様な最適化手法が存在する。多種多様なツールも存在する。手法とツールを一つひとつ接続することが大きなボトルネックとなっている。NIMOコントローラはこの両者を共通の方式で接続する。人間はコードを書かなくても実験フローを構築できる。画面上でツールを選択してつなぎ合わせる方式だ。ただし、この研究はまだ初期段階にあるため、広く普及した標準とみなすには時期尚早である。

ロケット材料の実験室において、この通信層がなぜ重要であるかを見る。材料研究室には異なるメーカーの機器が混在している。天秤、電気炉、回折装置の製造元はまちまちだ。これらを単一の人工知能で制御するには共通言語が必要となる。標準通信プロトコルは、これら多様な機器を一つの流れに統合する。新しい機器を導入しても大がかりな改修なしに接続できる。実験室の拡張や変更が容易になる。

標準通信にはもう一つの利点がある。人間がコードを知らなくても実験を組み立てられる点だ。人工知能はどのようなツールが存在するかを自律的に認識する。そのツールを画面上に並べることができる。人間はツールを選んで順序どおりにつなぐだけでよい。天秤で計量し、混合し、焼成し、回折で測定するという一連の流れを図を描くように組み立てる。実験構築の敷居が下がれば、より多くの研究者が自律実験室を利用ようになる。

この階層には限界もある。通信プロトコルはまだ新しく、定着の途上にある。機器メーカーによってプロトコルの準拠度合いは異なる。古い機器をプロトコルに適合させるのは困難だ。通信が途絶えたり信号が遅延したりすると実験が狂ってしまう。そのため、通信層自体にも安全装置が必要となる。この装置は命令を直ちに実行せず、まず検査を行う。それこそがステートマシンだ。

3.3.1 ステートマシンが守る最後の安全ライン

この小節は機器の安全を守るステートマシンを扱う。ステートマシンとは何であり、どのように危険な命令を阻止するのかを見る。自律実験室においてこの装置がなぜ最後の安全ラインとなるのかを検討する。ここで扱うステートマシンは、特定の製品がすでに完全に備えている機能ではない。前述したNIMOコントローラは、ツールをつなぐ調整に焦点を当てた研究である。ステートマシンやインターロックは、そうした調整の上に別途配置すべき共通の安全設計だ。本書はその安全設計を、自律実験室が備えるべき階層とみなす。

ステートマシンは機器の現在の状態をあらかじめ定められた枠に区分する方法だ。有限状態機械（Finite State Machine）は、取り得る枠をあらかじめ定めておく。例えば待機、準備、計量、移送、反応、分析、エラー、緊急停止といった枠がある。機器は常にこれらの枠のいずれか一つにある。ある枠から次の枠へと進む経路もあらかじめ規定しておく。

核心は、ある状態で許可された行動のみを実行する点にある。反応状態では電気炉が高温になっている。この時、ロボットアームが電気炉の扉を開ける命令は遮断される。温度が安全な値以下に冷えたという信号を受け取って初めて扉を開ける。この信号をセンサーが確認する。確認信号が届く前は、命令がステートマシンの段階で遮断される。このような遮断をインターロックと呼ぶ。インターロックは条件が合わなければ作動を制限する安全ロックだ。

この方式がなぜ安全なのかを分かりやすい例で見る。電子レンジは扉が開くと動作を停止する。扉が閉まって初めて稼働する。扉が開いたままでは、いくらボタンを押しても作動しない。これが状態に応じた行動制限で

ある。自律実験室のステートマシンも同じ原理で動作する。危険な状態では、危険な命令が最初から実行されない。

人工知能の文章による命令は、この規則を必ず通過しなければならない。人工知能がどれほど確信を持って命令を下しても、規則が最優先される。規則を通過した命令のみが機器ドライバへと送られる。ドライバは実際のモーターやバルブを駆動するプログラムだ。規則に抵触した命令は実行されず、記録のみが残る。この記録は後から原因を究明するための資料となる。

ロケット材料の実験において、この安全線は極めて貴重である。超高温の電気炉と反応性原料を扱うためである。小さなミスでも大事故につながりかねない。人がいない夜間はさらに危険である。ステートマシンは人工知能と装置の間の最後の安全の関門である。人工知能がミスをして、装置は危険な動作を行わない。自律実験室の自由は、この関門の内側でのみ許容される。

この仕組みにも限界がある。あらかじめ決めていない状態を扱うことは難しい。想定外の故障は決められた枠に収まらない。センサーが誤った信号を送れば、判断も誤る。そのため、ステートマシンだけでは不十分である。リアルタイムで装置を観察し、異常を察知する目が共になければならない。その目が、次節で取り上げるセンサー融合である。

3.4 乱雑な実験環境に耐えるロボット実行フレームワーク（PUDA）

本節では、ロボットが実際の実験環境で直面する困難を扱う。実験室は工場とは異なる。粉末は流動し、固まり、静電気を帯びる。るつぼは少しずつずれる。センサーにはノイズが混ざる。本節では、こうした乱れた環境に耐えるロボット実行フレームワークを見る。代表例としてPUDA研究を扱う。

実験室のロボットは、工場のロボットよりも困難な課題に直面する。工場では同じ部品が決まった位置に届く。実験室では粉末の性質が毎回異なる。ある粉末はよく流れる。ある粉末は固まってノズルを詰まらせる。ある粉末は静電気を帯びてあちこちに付着する。るつぼも置いたびに少しずつ位置がずれる。

このような乱れを外乱と呼ぶ。外乱は計画になかった妨害である。外乱があると、決められた動作だけでは作業を進められない。ロボットには目と感覚が備わっていなければならない。目はカメラであり、感覚は力センサーである。ロボットはこれらの情報をリアルタイムで読み取りながら動作を修正する。

PUDAは、このようなロボット実行環境を扱う事例である。名称の意味は物理統合デバイスアーキテクチャ（Physical Unified Device Architecture）である。自律実験室のための人工知能フレンドリーなハードウェアハーネスとも呼ばれる。ハーネスとは、複数の装置を一つに束ねて扱うフレームワークである。2026年に公開された初期の研究である。研究陣はジェンクン・レン、ホンジャオ・タン、ジアエン・イー、ケダール・ヒッパルガオンカルである。この研究が実際に示したのは、人工知能が扱いやすいコマンドライン実行環境とその内部の記録体系である。後述するセンサー融合とエラー復旧は、本論文が性能として実証したものではない。このような実行フレームワークが今後目指すべき方向性である。

PUDAの手法は、先行するシステムと少し異なる。人間向けの画面を前面に出さない。代わりに、人工知能エージェントが扱いやすいコマンドライン環境を構築する。各装置はコマンドラインから呼び出せるツールとして提示される。コマンドと応答は標準的な記録として残る。どの試料にどのようなコマンドが送られ、どのような結果が出たかが鎖のようにつながる。この履歴をプロベナンス（provenance）と呼ぶ。プロベナンスとは、データがどこからどのように生み出されたかについての来歴である。

ロケット材料研究において、この来歴記録がなぜ貴重であるかを見る。航空宇宙部品は品質追跡が厳格である。どのような原料で、どのような条件で作製されたかをすべて記録に残さなければならない。後で問題が生じた場合、この記録によって原因を突き止める。PUDAのようなシステムは、この来歴を自動的に記録する。人間が手作業で書き留めるよりも脱落が少ない。自律実験室が生成したデータも信頼して使用できるようになる。

PUDAがコマンドライン方式を選択したのは理由がある。人間向けの画面は見栄えが良い。しかし、人工知能エージェントが操作するには不便である。画面内のボタンは機械には押しにくい。コマンドラインツールは人工知能が直接呼び出しやすい。人工知能は状況を把握し、判断し、コマンドを下す。装置はそのコマンドを正確かつ再現可能に実行する。人間が実験を計画する頭脳と装置を動かす手を分離したわけである。このように分離すれば、頭脳を取り替えても手はそのまま使える。

この方式にも限界がある。コマンドライン環境は人間が直感的に確認するには不便である。装置ごとにコマンドラインツールを新しく作成しなければならない。旧式の装置はこのようなフレームワークに適合させることが難しい。標準的な記録を残すには保存と管理に手間がかかる。この研究もまだ初期段階にある。多様な実験室で広く使われるようになるには、さらなる時間が必要である。

3.4.1 複数のセンサーを統合して判断し、失敗から復旧する

本小節では、複数のセンサーの情報を統合して判断するセンサー融合を扱う。そして、失敗から自律的に復旧するプロセスを見る。これら2つの機能がなぜ実験の品質を守るのかを考察する。2つの機能はロボット工学において広く研究されてきた手法である。前節のPUDAのような実行フレームワークは、この手法を取り入れるための器である。ここでは特定のシステムの成果ではなく、手法の原理を見る。

センサー融合とは、複数のセンサーの情報を統合して判断することである。カメラは位置と形状を捉える。力センサーはロボットの手首にかかる力を捉える。温度センサーと圧力センサーは装置が安全であるかを確認する。一種類のセンサーだけを見ていては見落とすものが多い。複数のセンサーを組み合わせることで判断が正確になる。

一例として、ロボットががつぼを把持する場面を見る。カメラが遮られると位置が確認できなくなる。その際、力センサーが衝突を検知する。力が小さくて感知できない場合は、カメラが粉末のこぼれを捉える。異なるセンサーが互いの死角を補い合う。人間が手と目を併用するのと似ている。暗い部屋では手で探り、明るい場所では目で見える。

ロボットが何かに衝突すると、力センサーの値が急激に跳ね上がる。設定されたしきい値を超えると、ロボットは直ちに動作を停止する。停止した後は状況を再確認する。カメラで粉末がこぼれていないか、るつぼが滑っていないかを確認する。この再点検プロセスがエラー復旧の起点となる。

エラー復旧は通常、3段階で進められる。まず、何に問題が生じたのか異常を特定する。次に、失敗直前の安全な状態へとロボットを復帰させる。最後に、把持する位置や力を微調整して再度試行する。これら3つの段階を経ることで、些細なミスは人間の手を借りずに解決される。

エラー復旧は実験の品質にとっても重要である。誤って計量された試料のまま実験を進めると、質の悪いデータが蓄積される。質の悪いデータは人工知能モデルを誤った方向へ導く。そのため、自律実験室は失敗を隠さずに記録する。記録された失敗は次の学習データとなる。どこでなぜ失敗したかが分かれば、次は同じ過ちを回避できる。

この機能にも限界がある。センサーの値にもノイズが混ざる。ノイズを異常と誤認すると、正常な実験を止めてしまう。あまりに頻繁に停止すると実験が遅延する。逆にしきい値を緩く設定すると、本物の事故を見逃してしまう。したがって、この仕組みの感度を適切に調整しなければならない。この調整は依然として人間の経験に大きく依存している。自律復旧は人間を完全に排除するための仕組みではない。危険な試行錯誤の反復を減らし、必要な時に人間を呼び出すための仕組みである。

3.5 実際に稼働した自律実験室、パークレーA-Lab

本節では、実際に稼働した自律実験室の代表的な事例を見る。米国ローレンス・パークレー国立研究所のA-Labである。この事例が何を成し遂げ、どのような壁に突き当たったのかを考察する。成果の数値をどのように読み解くべきかも併せて論じる。

A-Labは、ローレンス・バークレー国立研究所が構築した自律型無機材料合成プラットフォームである。無機材料とは、金属や酸素などの元素から構成される物質である。酸化物やリン酸塩がこれに該当する。A-Labは計算データから合成有望な候補を選定した。そしてロボットで粉末を扱い、熱処理を施した。X線回折装置で結果を確認した。人間の手をほとんど介さずにこのプロセスを継続した。

成果の数値を正確に読み解くことが重要である。A-Labは2023年にNature誌の論文として発表された。当初発表された成功の数値は、後に再検討されて下方修正された。他の材料化学者たちが回折パターンを再解析したのである。2026年、Nature誌は訂正記事を掲載した。訂正後の数値は57の目標のうち36である。本書は訂正された数値を基準とする。当初のより高い数値は採用しない。

この訂正プロセス自体が貴重な教訓である。訂正の核心は2点ある。第1に、自動分析における誤認である。成功判定は自動X線回折分析が担っていた。この分析が、未反応のまま残った原料のシグナルを目的の新規物質のシグナルと誤読したのである。一見すると新しい結晶が生成されたかのように見えた。人間が回折パターンを改めて詳細に分析して初めて、この誤認が明らかになった。第2に、「新物質」という言葉の意味である。当初は世界に存在しなかった物質を合成したかのように受け止められた。しかし再確認すると、その多くはこの実験室のデータに存在しなかった物質という意味であった。科学界全体にとって初となる物質とは異なる。訂正記事では、報告された成功を人間が再確認し、一部は不確定のまま保留とされた。したがって、自律実験室の判定は最終的な正解ではない。精密な分析と再現試験を経て初めて真の成功となる。自律実験が迅速であるからといって検証を省略すれば、かえって誤りが積み重なることになる。

ロケット材料研究において、この事例が持つ意味を考える。A-Labは、自律合成が実験室の外の空想ではないことを実証した。酸化物やセラミックス系は、ロケットの遮熱材へとつながる。こうした材料を人間よりも迅速に探索する道が開かれた。ただし、成功判定の厳格さが伴わなければならない。航空宇宙部品では、わずかな不純物であっても重大な問題となり得る。そのため、速度と同じくらい検証が重要である。

A-Labは3つの明確な壁を露呈させた。次小節ではそれぞれの壁について詳しく見る。これらの壁は、他の自律実験室も共通して直面する課題である。課題を正確に把握することが、次のシステムを構築する礎となる。

3.5.1 システム構成と運用成果

本小節では、A-Labがどのような構成要素から成り立っているかを見る。そして、それらの要素がどのように連動して機能したかを考察する。自律実験室の実際の姿を具体的に描き出す。

A-Labの構造は3つの部分に分けることができる。計算層は候補物質と合成法を選定する。実行層ではロボットと装置が実際に試料を作製する。測定層ではX線回折装置が結果を確認する。これら3つの層が計算から実行へ、実行から測定へとつながり、一連のサイクルを形成する。

計算層は大規模データベースから候補を選定した。「マテリアルズ・プロジェクト（Materials Project）」と呼ばれるオープンデータを使用した。Googleの計算データも併用した。これらのデータは熱力学的に安定し得る物質を予測する。安定しているとは、その物質が分解されずに状態を維持できることを意味する。A-Labは、このように予測された物質をターゲットとした。

実行層には複数のロボットアームが配置されていた。ロボットは粉末を計量する場所、混合する場所、加圧成形する場所、焼成する場所の間で試料を搬送した。粉末を正確に計量し、ボールミルで混合した。ボールミルとは、小さなボールが入った容器内で粉末を粉砕・混合する装置である。混合した粉末を加圧して小さなペレットに成形した。そのペレットを高温の電気炉で焼成した。

測定層の中核装置はX線回折計である。X線回折（X-ray Diffraction）は、X線を照射して結晶構造を分析する方法である。結晶ごとにX線の回折パターンが異なる。このパターンは物質の指紋のようなものである。人工知能はこのパターンを読み取り、目的の物質が合成されたかを判定する。パターンが目標と一致すれば成功としてカウントされる。

A-Labはこのプロセスを何日も連続して稼働させた。人間が夜間に眠っている間にも実験は継続された。これは、自律実験室が論文内のアイデアから実際の装置へと具現化されたことを示している。多くの目的物質が人

間の介入なしに合成された。この成果は、自律的材料合成の扉を開いた事例として位置づけられる。

しかし、完全な無人運用ではなかった。人間の研究者がシステムをセットアップし、監視した。失敗した実験は人間が共に検討した。成功判定も後に人間が再確認した。自律実験室は人間の作業負担を軽減するが、人間を排除したわけではない。人間はより高次元の判断と検証を担う。細かな反復作業は機械が担う。この分業こそが、現在の自律実験室の実態である。

3.5.2 A-Labが露呈させた3つの壁

本小節では、A-Labが露呈させた3つの壁を1つずつ見ていく。これらの壁は、自律実験室が克服すべき共通の課題である。問題を正確に把握してこそ、次のシステムを適切に構築できる。

第1の壁は、合成結果の判定の困難さである。成功としてカウントされた物質の一部は単相ではなかった。単相とは、目的とする単一の結晶のみが純粋に存在する状態である。ある試料には未反応の原料が残存していた。ある試料には二次相が混在していた。二次相とは目的外の別の結晶である。回折パターンが目標と似ていても不純物が混ざっている可能性がある。したがって、単相であるかどうかを厳格に確認しなければならない。

第二の壁は粉末の処理である。粉末は種類ごとに性質が異なる。静電気を帯びる粉末もある。二酸化チタンやナノ粉末がその例である。このような粉末はノズル内部に付着する。そうすると計量ノズルが詰まる。湿気を吸収しやすい原料も扱いにくい。自動計量器は、このような多様な粉末を前にして頻繁に停止する。人間であれば手で軽く叩いて解決できることでも、機械は詰まってしまう。

第三の壁は環境制御である。A-Labは大気に開放された環境で稼働していた。空気中には酸素と水分が存在する。酸素や水分に弱い材料は、このような環境では扱うことができない。合成した途端に性質が変化したり分解したりするためである。全固体電池用の硫化物系およびハライド系材料がこの問題に直面する。こうした材料は空気に触れると使用できなくなる。そのため、大気に開放されたA-Labではこれらの材料を探索できなかった。

これらの壁は、なぜ自律化が難しいのかを如実に示している。人間は目と手の経験によってこのような問題を解決する。粉末が固まれば容器を軽く叩く。試料に異常があれば匂いや色で察知する。機械には、こうした経験を一つひとつ教え込まなければならない。人間が無意識に行っていることが、機械にとっては困難なのである。自律実験室の発展は、こうした微細な感覚を機械へと移植していく過程である。

これら三つの壁は互いに絡み合っている。粉末処理が不十分であれば計量が狂う。計量が狂えば結果の判定も揺らぐ。環境制御ができなければ、そもそも合成すらできない材料が存在する。自律実験室の適用範囲を広げるには、これらの壁を共に乗り越えなければならない。どれか一つだけを改善しても大きな進展は望めない。

ロケット材料の研究において、これらの壁はさらに大きな障壁となる。ロケットに用いる新規バッテリー材料や特殊化合物は、反応性が高い場合が多い。空気に弱い材料も多数存在する。こうした材料を扱うには、環境制御が前提とならなければならない。大気開放型の実験室では、この材料群に着手することは困難である。そのため、環境制御という第三の壁がロケット材料研究においてとりわけ大きな課題となる。

この壁を乗り越えようとする取り組みが次節の主題である。空気に弱い材料を扱うには密閉された環境が必要となる。その環境こそがグローブボックスである。次節では、密閉環境で稼働する自律実験室を取り上げる。A-Labの第三の壁に正面から挑んだシステムである。

3.6 密閉環境で空気に弱い材料を探索する（A-Lab GPSS）

本節では、密閉された環境で稼働する自律実験室を扱う。前節で取り上げた第三の壁を克服するためのシステムである。空気に弱い材料を扱う方法について考察する。

グローブボックスとは、手袋が取り付けられた密閉ボックスである。ボックスの壁面に厚手のゴム手袋が備え付けられている。人間は外部から手袋に手を入れて内部の作業を行う。ボックス内は通常、アルゴンのような不活性ガスで満たされる。不活性ガスとは、他の物質と反応しにくい気体のことである。そのため、ボックス

内には酸素や水分がほとんど存在しない。

このシステムの名はA-Lab GPSSである。GPSSはグローブボックス保護合成システムを意味する。大気開放型A-Labの限界を超えるために開発された次世代システムである。超高純度アルゴンで満たされた大型グローブボックス内に装置一式を設置している。水分と酸素を100万分の1未満の低水準に保つ。この内部で原料の保管、計量、成形、密閉、熱処理のすべてを行う。試料が空気に触れる瞬間を排除することが核心である。

この事例は2026年のプレプリント論文で確認できる。研究チームはFei Yuらである。空気に弱いリチウムハライド系スピネル型伝導体を扱った初期の研究である。論文では352個の試料を合成したと報告されている。可能な金属ペアの組み合わせは171種類であった。このうち72パーセントを実験によってカバーした。ここでいう72パーセントは成功率ではない。可能な組み合わせのうち実験で網羅した割合である。この数値を成功率と誤読してはならない。

論文は、実験を重ねるにつれて結果が向上したと述べている。最初の75個の試料では良好な結果の割合が低かった。最後の75個の試料ではその割合が上昇した。人工知能が前段階の実験から学習し、後続の実験を改善したのである。これは閉ループ学習が実際に機能することを示している。ただし、この研究も初期段階にあるため、過度な一般化は避けるべきである。

ロケット産業において、この密閉型自律実験室がなぜ価値を持つのかを見てみよう。宇宙船には高性能なバッテリーが必要である。全固体電池は安全性とエネルギー密度に優れた有力候補である。その中核をなすのが固体電解質である。しかし、優れた固体電解質は空気に弱いケースが多い。密閉型自律実験室は、こうした材料を安全に探索する。反応性の高いロケット材料の研究にも同様の環境が用いられる。

3.6.1 空気に弱いリチウムハライド固体電解質

本小節では、ここで扱う材料について詳しく見る。リチウムハライド固体電解質とは何かを平易な言葉で解説する。なぜこの材料が空気に弱いのか、そしてなぜ価値があるのかを考察する。

まずバッテリーに関する用語を解説する。リチウムイオンは、バッテリー内部で電荷を運ぶ微小な粒子である。バッテリーが充放電する際にこのイオンが行き来する。電解質は、このイオンが通過する経路である。一般的なバッテリーは液体電解質を用いている。液体は漏洩したり引火したりする恐れがある。

固体電解質は、この経路を固体にしたものである。固体電解質はリチウムイオンをスムーズに通さなければならない。しかし、電子はしっかりと遮断する必要がある。イオンを通し電子を遮断する固体こそが優れた電解質である。固体は液漏れせず、火災にも強い。そのため、全固体電池はより安全なバッテリーとして位置づけられている。

リチウムハライド電解質は、ハロゲン元素を含む固体電解質である。ハロゲンとは塩素、臭素、ヨウ素といった元素を指す。化学式としては、リチウム、金属、ハロゲンが一定の比率で結合している。この材料は高電圧電極との相性が良い可能性がある。電圧が高ければ、同じサイズでより多くのエネルギーを蓄えることができる。そのため、次世代バッテリー材料として注目を集めている。

問題は、この材料が水に極めて弱い点である。このような性質を潮解性と呼ぶ。潮解性とは、空気中の水分を吸収して自ら溶解する性質である。微量の水分に触れただけでも相が分解してしまう。分解する際には塩化水素などの有害なガスが発生する可能性がある。そのため、原料の保管、合成、測定のすべてを密閉環境で行わなければならない。

この条件が自律実験室の構築を難しくしている。密閉ボックスの内部は狭く、作業が困難である。ロボットは狭小な空間で精密に動作しなければならない。空気への暴露は一瞬たりとも許されない。人工知能は候補組成や合成条件を提案する。ロボットは空気に触れさせることなく同一の手順を反復する。分析装置はイオン伝導度と結晶相を迅速に確認する。これらすべての工程が密閉空間の中で連動して機能する。

イオン伝導度を測定することも重要である。イオン伝導度とは、リチウムイオンがどれほどスムーズに移動できるかを示す値である。この値が高くなければ、バッテリーは十分な出力を発揮できない。自律実験室は合成

した試料の伝導度を直ちに測定する。そしてその値を人工知能の最適化目標に設定する。伝導度が高い組成を目指して次の実験を選択する。結晶相と伝導度を併せて評価しながら、優れた電解質の候補を絞り込んでいく。

この材料探索には限界も残されている。密閉環境では装置の出し入れが困難である。狭小な空間ゆえに配置できる装置も制限される。潮解性材料はわずかなミスで使用不能となる。そのため、実験の一つひとつに慎重さが求められる。自律化によって速度が向上したとしても、この慎重さを緩めることはできない。密閉型自律実験室が扱える材料の範囲は、現時点ではまだ限られている。

3.6.2 帰納とアブダクションを行き来する二重ループ

本小節では、自律実験室が用いる二つの思考様式を扱う。帰納とアブダクションである。この二つを交互に用いることで、なぜ探索が加速するのかを見ていく。この手法は、本節のA-Lab GPSS研究が明らかにした推論構造である。

帰納とは、複数の実験結果から共通の規則を見出す思考である。回折パターンや伝導度の測定結果を収集する。どの組成が良好に合成されたかを精査する。複数の試料を並べて傾向を読み解く。格子定数に変化するにつれて伝導度がどのように変わるかを把握する。このようにして蓄積された規則が、次の実験の基盤となる。

アブダクションとは、予期せぬ結果に直面した際にその原因を探る思考である。アブダクションは、異例の結果を最も適切に説明できる原因を選択する推論である。ある試料から予期せぬ不純物相が生じたとしよう。原料の反応が不完全だったのか、温度が低すぎたのかを検証する。その中から最も妥当な原因を選択し、次の実験条件を変更する。アブダクションは、一つの驚くべき結果から直ちに次の一手を見出す。多数の結果から規則を抽出する帰納とは方向性が異なる。

自律実験室は、これら二つの思考を交互に用いる。密度汎関数理論（DFT）計算が有望な候補をあらかじめ絞り込む。この計算は原子レベルで物質のエネルギーを算出する。ここで選定された候補を実験によって検証する。実験結果が蓄積されると帰納によって規則が見出される。予期せぬ結果が生じた場合には、アブダクションが原因を特定して方向を修正する。このようにして計算と実験が互いを洗練させていく。思考が一方だけに流れるのではなく、ループを描いて循環するのである。

この手法を身近な例で考えてみよう。見知らぬ街で道を探す場面を思い浮かべてほしい。何度も歩いてみて近道の法則を見つけるのが帰納である。突如として道が塞がれていた際、原因を推測して迂回するのがアブダクションである。規則だけに頼ってでは予期せぬ事態で足が止まる。原因の推測ばかりに気を取られては全体像を見失う。両者を組み合わせることで、目的地により早く到達できる。自律実験室も二つの思考を併用することで、優れた材料へ迅速に到達するのである。

ロケット材料の研究において、この二重ループがなぜ価値を持つのかを見てみよう。新材料は計算のみで完全に把握できるものではない。計算は理想的な条件を前提としている。実際の合成には不純物やノイズが伴う。一方で実験だけでもすべてを把握することはできない。実験には多大な時間と費用がかかる。両手法を組み合わせることで、計算によって範囲を絞り込み、実験によって検証することが可能になる。コストの高いロケット材料探索において、この組み合わせは大きな威力を発揮する。

この手法にも限界が存在する。計算と実験の言語は互いに異なる。計算結果を実験結果とすり合わせる作業は極めて困難である。計算が誤っていれば、不適切な候補のために実験リソースを浪費することになる。実験のノイズが大きければ、計算モデルを誤って修正してしまう。したがって、二つのループを結ぶ架け橋を適切に構築しなければならない。この橋渡しを行う作業は、依然として人間の判断に大きく依存している。

3.6.3 複数の人工知能が役割を分担する協調

本小節では、複数の人工知能が役割を分担して協調する手法を扱う。これをマルチエージェントと呼ぶ。なぜ単一の人工知能よりも複数の方が優れているのか、どのようなリスクが存在するのかを考察する。

マルチエージェントとは、複数の人工知能が役割を分担する構造である。エージェントとは自律的に判断し行動する人工知能の単位を指す。一人の人間がすべての作業を行うよりも、チームで分担して進めることに似ている。自律実験室において、こうした役割分担は極めて自然である。実験には化学知識、計画立案、安全管理、データ分析のすべてが求められるためである。

役割を分担することで、各エージェントは一つのタスクに集中できる。化学エージェントは反応式の妥当性を検証する。質量が保存されているか、酸化数が一致しているかを検査する。原料がルツボと好ましくない反応を起こさないかも確認する。計画エージェントは装置の稼働順序を策定する。長時間の熱処理といったボトルネック作業をあらかじめ分割する。どの作業を並行して実行できるかも決定する。

安全エージェントは実験室を見守る目である。グローブボックス内の酸素および水分濃度を監視する。圧力変化や電気炉の冷却水の流量も確認する。極めて短い周期でこれらの数値を繰り返し照合する。異常な値が検出されれば警告を発し、ログに記録を残す。ただし、実際の緊急停止はこのエージェントが直接実行するわけではない。生成型エージェントは応答が遅延したり判断を誤ったりする可能性があるためである。酸素濃度や圧力が危険域に達した場合、独立したセンサーと検証済みの安全コントローラーが直ちに装置を停止させる。このハードウェアインターロックは、言語モデルの判断を待つことはない。エージェントは監視と記録を担当し、停止動作は検証済みの安全装置が担うのである。分析エージェントは測定結果を解釈する。回折パターンをデータベースと照合する。不純物の含有量を数値化する。その数値を学習モデルの目的関数に入力する。

2026年には、こうしたマルチエージェント実験室に関する研究が大幅に増加した。ある研究では、複数の人工知能エージェントをコーディネーターのもとに統合した。各エージェントは異なるツールを分担して使用した。知識を検索するグループ、設計を実行手順へと変換するグループ、ロボットを制御するグループ、データを解釈するグループに分かれた。このようにグループを形成して閉ループ材料探索を実現した。また別の研究であるChatMatは、複数のエージェントによって物性予測ワークフローを自動的に連結した。自律実験室の管理におけるマルチエージェントの意義を論じた論文も発表された。

役割を分担することの利点は明白である。各エージェントが担うタスクを明確に把握できる。問題が発生した際、どの段階で起きたのかを特定しやすい。一つのエージェントを修正しても、システム全体を変更する必要はない。新たなツールを追加することも容易である。これは、人間によるチーム連携が持つ利点と同様である。

マルチエージェントは科学の手法そのものも変える。以前は人間の研究者が実験を一つ一つ記録していた。今ではエージェントが判断プロセスをデータとして残す。なぜこの条件を選んだのか、なぜこの結果を成功とみなしたのかが残る。この記録は後から研究を振り返る際に使われる。ただし人工知能の判断は常に透明であるとは限らない。なぜそのような決定を下したのかを人間がすべて把握することは難しい。この不透明さは今後解決すべき課題として残る。

しかしリスクも同時に大きくなる。大規模言語モデルは存在しない事実を作り出すことがある。あるエージェントの誤りが他のエージェントへと波及することもある。複数のエージェントが互いを信じ切って受け渡すと、誤りを検知できなくなる。そのため、最終権限は安全ルールと人間の監督者にあるべきだ。人工知能が自信を持って述べていても、装置は危険にさらされ得る。エージェントが増えるほど、人間によるクロスチェックとハードウェア安全装置がより重要になる。

まとめ

本章では自律実験室がどのように作動するかを見てきた。核心は閉ループという環状構造だ。人工知能が次の実験を選ぶ。ロボットが作る。装置が測る。結果が再び人工知能へと戻る。このループが昼夜を問わず回り、広大な材料空間を素早く絞り込む。

人工知能が次の実験を選ぶ方法はベイズ能動学習である。この手法は予想される性能と不確実性を共に見る。見込みのある領域と未知の領域をバランスよく選ぶ。そのため、少ない実験で優れた材料に到達できる。高コストなロケット材料の探索において、この点が大きな強みとなる。

論文内の合成手法は大規模言語モデルが抽出する。MSP-LLMのような研究がこの役割を担う。抽出された手順はPDDLのような計画言語へと安全に変換される。計画言語はロボットの事故を未然に防ぐ防壁となる。人工知能と装置はモデルコンテキストプロトコルのような標準で結ばれる。NIMOコントローラがその事例だ。ステートマシンは危険な指示を最後に阻止する関門である。

ロボットは乱れた実験環境に耐えなければならない。複数のセンサを同時に読み取るセンサフュージョンがこれを助ける。失敗を自らやり直すエラー回復も連動する。PUDAのようなシステムは指示と結果を記録として残す。この記録は航空宇宙部品の品質トレーサビリティにおいて価値がある。

実際の事例としてA-LabとA-Lab GPSSを取り上げた。A-Labは17日間に57個の目標のうち36個を作製した。この数値は2026年の訂正を経た値である。自律実験室の判定であっても人間の再検討が必要であることを、この事例が示している。A-Lab GPSSは密閉環境下で空気に弱い材料を扱った。352個の試料によって、可能な金属ペアの組み合わせの72パーセントをカバーした。この数字は成功率ではなく組み合わせのカバレッジである。

2026年に入り、この分野は急速に広がった。複数の人工知能が役割を分担するマルチエージェント実験室が増加した。標準通信によって装置を結ぶ試みも続いた。バイズ最適化を実験の流れに合わせて整える研究も活発だった。自律実験室を幅広く網羅した総合論文や手引きも発表された。大きな流れは明確である。人間の手を細かな繰り返し作業から解放する方向だ。しかし、判断と検証の座は依然として人間に残されている。

本章で扱ったシステムは大部分が初期の研究である。プレプリントが多く、現場の標準はまだ少ない。そのため、性能の数値を誇示するよりも、原理と限界を共に見つめた。自律実験室は人間を排除するためのツールではない。危険な繰り返し作業を機械に任せ、人間は判断と検証を担う。自律実験室の真の意義は、迅速な実験ではなく信頼できる実験にある。この原則の上に立てこそ、ロケット材料研究の自動化が安全に発展する。

関連根拠資料

- King, R. D., Rowland, J., Oliver, S. G., Young, M., Aubrey, W., Byrne, E., Liakata, M., Markham, M., Pir, P., Soldatova, L. N., Sparkes, A., Whelan, K. E., & Clare, A. (2009). The automation of science. *Science*, 324(5923), 85-89. <https://doi.org/10.1126/science.1165620>
- MacLeod, B. P., Parlane, F. G. L., Morrissey, T. D., Häse, F., Roch, L. M., Dettelbach, K. E., Moreira, R., Yunker, L. P. E., Rooney, M. B., Deeth, J. R., Lai, V., Ng, G. J., Situ, H., Zhang, R. H., Elliott, M. S., Haley, T. H., Dvorak, D. J., Aspuru-Guzik, A., Hein, J. E., & Berlinguette, C. P. (2020). Self-driving laboratory for accelerated discovery of thin-film materials. *Science Advances*, 6(20), eaaz8867. <https://doi.org/10.1126/sciadv.aaz8867>
- Szymanski, N. J., Rendy, B., Fei, Y., Kumar, R. E., He, T., Milsted, D., McDermott, M. J., Gallant, M., Cubuk, E. D., Merchant, A., Kim, H., Jain, A., Bartel, C. J., Persson, K. A., Zeng, Y., & Ceder, G. (2023). An autonomous laboratory for the accelerated synthesis of inorganic materials. *Nature*, 624(7990), 86-91. <https://doi.org/10.1038/s41586-023-06734-w>
- Szymanski, N. J., Rendy, B., Fei, Y., Kumar, R. E., He, T., Milsted, D., McDermott, M. J., Gallant, M., Cubuk, E. D., Merchant, A., Kim, H., Jain, A., Bartel, C. J., Persson, K. A., Zeng, Y., & Ceder, G. (2026). Author correction: An autonomous laboratory for the accelerated synthesis of inorganic materials. *Nature*, 650, E1. <https://doi.org/10.1038/s41586-025-09992-y>
- Merchant, A., Batzner, S., Schoenholz, S. S., Aykol, M., Cheon, G., & Cubuk, E. D. (2023). Scaling deep learning for materials discovery. *Nature*, 624(7990), 80-85. <https://doi.org/10.1038/s41586-023-06735-9>
- McDermott, M. J., Dwaraknath, S. S., & Persson, K. A. (2021). A graph-based network for predicting chemical reaction pathways in solid-state materials synthesis. *Nature Communications*, 12, 3097. <https://doi.org/10.1038/s41467-021-23339-x>
- Tom, G., Schmid, S. P., Baird, S. G., Cao, Y., Darvish, K., Hao, H., Lo, S., Pablo-García, S., Rajaonson, E. M., Skreta, M., Yoshikawa, N., Corapi, S., Akkoc, G. D., Strieth-Kalthoff, F., Seifrid, M., & Aspuru-Guzik, A. (2024). Self-driving laboratories for chemistry and materials science. *Chemical Reviews*, 124(16), 9633-9732. <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.4c00055>
- Boiko, D. A., MacKnight, R., Kline, B., & Gomes, G. (2023). Autonomous chemical research with large language models. *Nature*, 624, 570-578. <https://doi.org/10.1038/s41586-023-06792-0>
- Noh, H., Na, G. S., Lee, N., & Park, C. (2026). MSP-LLM: A unified large language model framework for complete material synthesis planning. *arXiv preprint, arXiv:2602.07543*. <https://arxiv.org/abs/2602.07543>
- Yoshikawa, N., & Tamura, R. (2026). NIMO Controller: a self-driving laboratory orchestrator based on the Model Context Protocol. *arXiv preprint, arXiv:2605.15227*. <https://arxiv.org/abs/2605.15227>
- Tamura, R., & Yoshikawa, N. (2026). NIMO: A software platform for closed-loop materials exploration with diverse AI algorithms. *arXiv preprint, arXiv:2606.15522*. <https://arxiv.org/abs/2606.15522>
- Ren, Z., Tan, H., Yee, J., & Hippalgaonkar, K. (2026). PUDA: An AI-native hardware harness for self-driving laboratories. *arXiv preprint, arXiv:2607.26464*. <https://arxiv.org/abs/2607.26464>

- Fei, Y., Rendy, B., Yang, X., Woo, J., Huang, X., Li, C., Wang, S., Milsted, D., Zeng, Y., & Ceder, G. (2026). Agentic LLM reasoning in a self-driving laboratory for air-sensitive lithium halide spinel conductors. arXiv preprint, arXiv:2604.11957. <https://arxiv.org/abs/2604.11957>
- Kusne, A. G., & McDannald, A. (2026). Managing autonomous materials labs with multi-agent AI and its implications for the science of science. *Communications Materials*, 7, 173. <https://doi.org/10.1038/s43246-026-01219-5>
- Lv, S., Peng, L., Jiao, S., Yao, Y., Wu, W., & Hu, W. (2026). ChatMat: a multi-agent chemist for autonomous material prediction and exploration. *Digital Discovery*, 5(7), 2886-2898. <https://doi.org/10.1039/d5dd00582e>
- Lee, H., Yoo, H. J., Jang, H. S., Park, B., Park, Y. J., & Han, S. S. (2026). Toward self-driving laboratory 2.0 for chemistry and materials discovery. *Materials Horizons*, 13(10), 4712-4739. <https://doi.org/10.1039/d5mh01984b>
- Zhu, J., Zhang, L., Zhu, Y., Lin, X., Wu, Y., Di, S., Liu, B., Luo, Y., & Zhang, T. (2026). A survey of agentic materials science and engineering: where are we and where are we going? *Journal of Materials Informatics*, 6, 7. <https://doi.org/10.20517/jmi.2026.07>
- Tobias, A. V., & Wahab, A. (2025). Autonomous 'self-driving' laboratories: a review of technology and policy implications. *Royal Society Open Science*, 12(7), 250646. <https://doi.org/10.1098/rsos.250646>
- Wakabayashi, Y. K., & Otsuka, T. (2026). Bayesian optimization for self-driving materials laboratories: From algorithms to physics-informed workflows. arXiv preprint, arXiv:2608.26016. <https://arxiv.org/abs/2608.26016>
- Ntagiantas, A., Tsilimidos, P., Giannakopoulos, G., Rekatsinas, C., & Krokidas, P. (2026). Active learning guided design space refinement for scalable multi-objective Bayesian optimization in materials discovery. arXiv preprint, arXiv:2608.04651. <https://arxiv.org/abs/2608.04651>
- He, C., Singull, M., & Jacobsson, T. J. (2026). Bayesian optimisation for the experimental sciences: A practical guide to data-efficient optimisation of laboratory workflows. *Advanced Intelligent Systems*, 8(5), e202501149. <https://doi.org/10.1002/aisy.202501149>
- Liang, H., Sun, Y., Paxson, R., Lee, C.-Y., Hall, A. T., Warecki, Z., Cumings, J., Koinuma, H., Kusne, A. G., Lippmaa, M., & Takeuchi, I. (2026). Autonomous epitaxial atomic-layer synthesis via real-time computer vision of electron diffraction. arXiv preprint, arXiv:2602.20432. <https://arxiv.org/abs/2602.20432>
- Anthropic. (2025). Model Context Protocol specification (version 2025-06-18). <https://modelcontextprotocol.io/specification/2025-06-18>
- Anthropic. (2024). Introducing the Model Context Protocol. <https://www.anthropic.com/news/model-context-protocol>

第4章 ハイエントロピー合金（HEA）および超合金の物理一貫性予測と組成最適化

はじめに

台所で一つの鍋を長く使っていると、底が黒く焦げ付く。火によく当たる部分が先に傷む。金属は熱くなるほど柔らかく弱くなる。熱によって弱くなるこの性質は、すべての金属が等しく持っている。

ロケットエンジンはこの問題をどの機械よりも深刻に経験する。燃焼室の中では燃料が燃えて数千度のガスが生成される。そのガスはノズルという狭い通路を通して急速に噴出する。ノズル壁はこの高温のガスをすぐそばで耐えなければならない。鍋の底とは比較にならないほど過酷な場所である。

大気圏へ再突入する飛行体も同じ悩みを抱える。高速で空気を押し分けながら進入すると、空気が圧縮されて高温になる。飛行体の前面は赤く加熱される。この熱に耐えられなければ、構造が溶けたり破損したりする。

この空気加熱は手のひらで感じてみることができる。自転車を速く漕ぐと、顔に風が強く当たる。手を窓の外に出すと、風が手を押し戻す。飛行体はその風を数千倍速く受ける。押し出された空気が圧縮されて加熱され、その熱が前面へと伝わる。再突入表面のよどみ点温度は摂氏1,600度を超える。

極超音速飛行体も同じ熱に直面する。極超音速は音速の5倍を超える速度である。この速度で飛行すると、主翼の先端部が他の場所よりも高温になる。狭く尖った部分に熱が集中するためである。そのため、この部分には高温に耐える能力に優れた素材が用いられる。

そのため人々は、非常に高温の環境でも強度を失わない金属を探し求めてきた。長い間その位置を守ってきた金属がニッケル基超合金（Nickel-based superalloy）である。超合金は高温でも十分に耐えられるよう特別に設計された合金である。しかし、この金属にも限界温度が存在する。

本章はその限界を超えようとする新しい金属を取り上げる。その主役となるのがハイエントロピー合金（High-Entropy Alloy, HEA）である。複数の金属をほぼ同量ずつ混ぜ合わせた合金である。その中でも融点が高い金属だけを選んで混合すると、ロケット素材の新たな候補となる。このような合金を耐火ハイエントロピー合金（Refractory High-Entropy Alloy, RHEA）と呼ぶ。

本章はこのような金属を探索する新しい手法を説明する。人間が一つひとつ実験する代わりに、人工知能（AI）が候補を迅速に絞り込んでくれる。原子の配置、熱力学の法則、大規模な原子計算がどのように人工知能と結びつくのかを順を追って解き明かす。金属の話ではあるが、季節や学校の話題のように身近な例に置き換えて説明する。

なぜ人工知能が必要なのかをあらかじめ思い描いてみる。優れた合金を一つ作るためには、元素の種類と比率を決定しなければならない。元素が5種類だけでも、比率の組み合わせは数え切れないほどになる。一つひとつ作って試験しては、一生を費やしてもすべてを調べることはできない。人工知能はこの広大な候補をあらかじめ絞り込んでくれる。

人工知能の役割は案内に近い。山の中で道を知る案内人は近道を教えてくれる。しかし、頂上に登るのは結局の人間の役割である。人工知能が候補を絞り込み、人間が実験によって確認する。本章ではこのような協働がどのように行われるかを事例とともに示す。

4.1 極限宇宙航空環境の要求条件と高温合金の構造的限界

本節で扱う内容

本節では、ロケットや再突入飛行体が直面する熱環境がどれほど過酷であるかをまず描く。次に、長年使われてきたニッケル基超合金がどこで限界に突き当たるかを考察する。最後に、耐火ハイエントロピー合金がなぜ新たな代替案として浮上したのかを説明する。

わかりやすく言えば、本節は問題を定義する場である。問題を正確に把握してこそ、後述する人工知能ツールの有用性が見えてくる。そのため、数値よりも状況をまず理解することに重きを置く。

ロケット燃焼室は圧力が非常に高い容器である。燃料と酸化剤がその中で共に燃焼し、大きな圧力を生み出す。この圧力は数十メガパスカルに達する。自動車のタイヤの空気圧が約0.2メガパスカルである。ロケット燃焼室はその数百倍の圧力に耐える。

燃焼室で生成されたガスはノズルを通して排出される。このガスの温度は推進剤によって数千度にまで達する。ただし、壁面の金属の温度はガス温度ほどまでは上昇しない。冷却と境界層が熱を遮断し、金属温度を低く維持する。それでも壁面が受ける熱量は莫大である。この熱に耐えられなければ、壁が溶けて穴が開き、エンジンは使用不能になる。

熱は一度だけ加わるのではない。エンジンは着火と停止を繰り返す。着火時には急速に加熱され、停止時には急速に冷却される。このように温度が激しく上下することを熱衝撃（Thermal shock）と呼ぶ。ガラスのコップに突然熱湯を注ぐとひびが入るのと同じ原理である。

ここにさらに力まで加わる。高温の状態で長時間力を受け続けると、金属は徐々に伸びていく。この現象をクリープ（Creep）と呼ぶ。水飴の棒を長く持っているとき自然に垂れ下がるのと似ている。高温下ではこのクリープと繰り返し荷重が同時に作用し、材料を徐々に劣化させる。

ニッケル基超合金は、このような環境で長年耐えてきた金属である。この金属の強度は微細な組織から生まれる。母相となるガンマ（ γ ）相の中に、ガンマプライム（ γ' ）と呼ばれる微小な粒子がびっしりと埋め込まれている。この粒子が金属の変形を妨げる障害物の役割を果たす。生地の中に埋め込まれた小さなナッツが、生地が簡単に伸びるのを防ぐようなものである。

超合金によってこの障害物の種類は少しずつ異なる。ニオブ（Nb）を多く含むインコネル718（Inconel 718）がその一例である。この合金はガンマプライムよりもガンマダブルプライム（ γ'' , Ni₃Nb）と呼ばれる相が強度をより多く担う。障害物の名称は異なっても原理は同じである。微小な粒子が変形を防ぎ、金属を硬く強固にする。

ロケットは部位ごとに異なる金属を使用する。燃料で壁面を冷却する燃焼室には銅合金がよく使われる。熱を素早く逃がす性質に優れているためである。ニッケル基超合金はタービンのように高温を長時間受ける部品に用いられる。さらに高温となるノズルスロットや再突入表面には、耐火金属やセラミックスが候補となる。本章は中でも温度が最も高い部位を狙う新しい金属を取り上げる。

問題は温度がさらに上昇したときに現れる。およそ1,150度を超えると、この微小な粒子が粗大化したり崩れたりする。これを粗大化と呼ぶ。障害物が消失すると金属は容易に変形し、強度が急激に低下する。ニッケル基超合金の融点が約1,350度であることを考えると、有効な動作限界は融点よりもはるかに低いことになる。

これに加えて、有害な相が生成されることもある。高温に長時間さらされると、原子が特定の規則に従って集まり、硬くて脆い塊を形成する。このような相を有害相と呼ぶ。有害相が生成されると金属は脆く壊れやすくなる。優れた超合金ほど、このような相の生成を抑制するように設計される。

このような問題のため、ニッケル基超合金には冷却が必要となる。実際のエンジンでは部品の内部に微細な流路を設ける。その流路に低温の燃料を流して壁面を冷却する。この冷却のおかげで、融点より低い温度で部品を使用できる。しかし、冷却流路を設けると部品構造が複雑になり、重量も増加する。

耐火ハイレントロピー合金の目標は、この冷却を削減することである。材料自体がより高い温度に耐えられれば、冷却の必要性は減る。冷却が減れば、構造は軽量化され簡素になる。研究者たちは1,400度を超える環境で冷却なしに耐えられる材料を、新たな合金開発の目標としている。

そのため人々は、まったく異なるアプローチを模索した。融点そのものが高い金属を骨格にしようという発想である。ニオブ（Nb）、モリブデン（Mo）、タンタル（Ta）、タングステン（W）のような金属がこれに属する。これらは融点が2,000度を大きく上回る。このような金属を耐火金属（Refractory metal）と呼ぶ。

耐火ハイレントロピー合金は、これらの耐火金属を複数、ほぼ同量ずつ混合した合金である。近年の研究では、この合金が1,600度の圧縮試験においてもニッケル基超合金を上回る強度を示すことが報告されている。そのため、ロケット推進、極超音速飛行体の主翼前縁部、再突入時の熱シールドの新たな候補として注目されている。

しかし、利点ばかりではない。この合金は室温において脆く割れやすい傾向がある。これを低延性と呼ぶ。さらに高温で酸素と接触すると、表面がボロボロと崩れる酸化が起こる。この二点が、実用部品として採用する前に必ず解決すべき課題である。人工知能はまさにこの課題を迅速に解決するために活用される。

酸化の問題をもう少し詳しく見てみる。タングステンやモリブデンを多く含む合金は、高温で酸素と激しく反応する。表面の酸化被膜が強固に密着せず、粉末のように剥がれ落ちる。このようにボロボロと崩壊する酸化現象をペスト酸化（Pest oxidation）と呼ぶ。穀物を食い荒らす害虫のように表面を損耗させるという意味から名付けられた。

この問題を防ぐ手段が保護酸化被膜である。アルミニウムやクロムを適切に添加すると、表面に緻密な酸化被膜が形成される。この被膜が酸素の内部への侵入を阻止する。鍋の底に焼き付いた膜が、かえって内側の金属を保護するのと似ている。どれだけの量をどのように添加すれば良好な被膜が形成されるかが、設計の鍵となる。

コーティングとの適合性も重要である。合金の上には通常、耐酸化コーティングが施される。問題は、金属とコーティングが温度によって異なる割合で熱膨張する点にある。この伸びる度合いを熱膨張係数と呼ぶ。二つの材料の熱膨張係数が大きく異なると、温度上昇時に界面に亀裂が生じる。そのため合金は強度だけでなく、コーティングとの相性も考慮して調整しなければならない。

このようにノズルライナー用合金は、同時に多くの条件を満たさなければならない。高融点、低密度、高温強度、耐酸化性、コーティングとの適合性のすべてが求められる。条件同士が相反することも多い。このような複雑に絡み合った課題を、人間が実験だけで解決するのは困難である。人工知能は、この入り組んだ問題を迅速に整理するツールとして導入される。

4.2 4大コア効果の物理モデリングと相平衡熱力学

本節で扱う内容

本節では、ハイレントロピー合金がなぜ特別であるのか、その初期の説明の枠組みを扱う。この分野が初めて開拓された際、研究者たちは4つの効果を提唱した。この4つを4大コア効果と呼ぶ。配置エントロピー、格子歪み、遅い拡散、カクテル効果である。

この4つは確立された物理法則というよりも、初期の仮説に近い。後述するように、遅い拡散や高エントロピーによる単相安定化は、一般的な法則としては実証されていない。それでもこの枠組みを理解しておくことで、人工知能が何を計算しようとしているのかを把握できる。それぞれを日常生活の例に置き換えながら、一つずつ解説する。

まず、ハイレントロピー合金とは何であるかを確認する。通常の合金は、主となる1種類の金属に少量の他の金属を添加する。鋼は鉄が主成分であり、炭素が少量含まれる。ハイレントロピー合金はこのような方式とは異なる。5種類以上の金属をほぼ同量ずつ混合する。主役が複数存在するわけである。

この概念は2004年に2つの研究チームによってそれぞれ発表された。台湾のイエ（Yeh）研究チームと英国のカントール（Cantor）研究チームである。彼らは主元素1種類に依存しなくても安定した金属を作製できることを示した。この発見が、新たな合金設計の扉を開いた。

第1の原理は配置エントロピー（Configurational entropy）である。エントロピーとは混合の組み合わせの数に関係する値である。ロッカーに物を入れる方法が多いほど、無秩序さは大きくなる。複数の金属をほぼ同量ずつ混合すると、原子を配置する方法が非常に多くなる。この大きな無秩序さが、金属を均一に混合した状態に維持するのを助ける。

この均一に混ざり合った状態を固溶体（Solid solution）と呼ぶ。固溶体とは、複数の元素が単一の結晶格子の中に均一に溶け込んだ状態である。砂糖が水に溶けて一つの液体になる様子に似ている。エントロピーが大きいと、元素同士が別々に凝集して硬い金属間化合物を形成するのを防ぐ。そのためハイレントロピー合金は、化合物ではなく固溶体を形成しやすい。

第2の原理は格子歪み（Lattice distortion）である。金属原子はそれぞれ大きさが異なる。大きな原子と小さな原子が同一の格子内に混ざると、格子が凸凹に歪む。均一で滑らかなレンガの代わりに、大きさが不揃いな石を積み上げた石垣のようなものである。この歪んだ格子が、変形を阻止する障壁となる。

変形は転位（Dislocation）と呼ばれる微小な欠陥が格子内をすべることによって生じる。格子が凸凹に歪んでいると、転位はすべりにくくなる。砂利道で荷車を引くのが困難であるのと同様である。したがって、格子歪みが大きい合金は容易に変形せず、硬く強固になる。

第3の原理は遅い拡散（Sluggish diffusion）である。拡散とは原子が位置を移動する動きである。ハイレントロピー合金では原子ごとに周囲の環境が異なる。ある位置には移動しやすく、ある位置には移動しにくい。このばらつきが、全体として平均的に原子の移動を遅らせると考えられている。

原子がゆっくり動けば、高温でも組織が変化しにくい。そのため結晶粒の成長が遅くなり、クリープに強い性質を示し得る。ただし、この効果はすべてのハイレントロピー合金で常に強く現れるわけではない。実際の拡散速度は元素の組み合わせや温度、結晶構造によって異なる。そのため最近の研究では、この効果を普遍的な法則としてではなく、場合によって確認すべき性質として扱っている。

第4の原理はカクテル効果（Cocktail effect）である。カクテルは複数の材料を混ぜて新しい味を生み出す飲料である。個々の材料の味を足し合わせたものと、混ぜ合わせた後の味は同じではない。金属も同様である。複数の元素が共存するとき、各元素の性質を単に足し合わせた値では説明が難しい性質が現れる。

この非線形な性質は強度、耐食性、韌性に現れる。問題は、このような組み合わせ効果を人間が事前に把握することが難しい点にある。元素の組み合わせの数が膨大だからである。人工知能は、このように隠れた組み合わせ効果をデータから見つけ出すツールとして用いられる。

これら4つの原理はロケット材料に直接つながる。配置エントロピーは高温で組織が分解しないよう助ける。格子歪みは強度を高める。遅い拡散はクリープに対して有利に働き得る。カクテル効果は耐酸化性のような予想外の利点をもたらす。4つの原理が共に機能してこそ、極限環境に耐えられるのである。

ただし、これらの原理は万能の鍵ではない。ある組み合わせでは強く、別の組み合わせでは弱く現れる。そのため、原理を理解していても実際の組成は一つひとつ確認しなければならない。原理は方向性を示し、確認は計算と実験が担う。人工知能はこの確認を迅速に前倒しする。

これら4つの原理は、結局一つの問いへと集約される。どのような組成が単一相として安定して残るかという問いである。この問いに答える学問が相平衡熱力学である。次の二つの小節では、この判断を助ける二つの指標を見ていく。

4.2.1 単一相として残る可能性を測るオメガパラメータ

熱力学はエネルギーと安定性を扱う学問である。どの状態が安定しているかは自由エネルギー（Free energy）で判断する。自由エネルギーが低い状態のほうがより安定である。水が高いところから低いところへ流れるように、物質は自由エネルギーが低い状態へと向かおうとする。

自由エネルギーは二つの値によって共に決定される。一つはエンタルピー（Enthalpy）である。エンタルピーは原子同士が引き合うか反発し合うかに関連する値である。相性の良い原子同士は混ざり合おうとし、反発し合う原子同士は分離しようとする。もう一つは前述のエントロピーである。エントロピーは混ざり合いの無秩序さを示す。

この二つの力比べは温度によって変化する。温度が高いほどエントロピーの影響力が強くなる。熱い部屋の中で人々がより自由に散らばるのと同じである。そのため高温では無秩序な固溶体が安定になりやすい。ハイレ

ントロピー合金が高温で単一相として残りやすい理由はここにある。

配置エントロピーは元素を等モル比で混合するときが大きくなる。等モル比とは各元素を同じ量で加えることである。5つの元素を同じ量で混ぜると、配置エントロピーは最大値に達する。元素数が増えるほどこの値はさらに大きくなる。配置エントロピーが大きいというこの性質から、ハイエントロピーという名が生まれた。

オメガパラメータは、単相固溶体の可能性を簡便に見積もる値である。この値は三つの要素を総合して評価する。平均融点、配置エントロピー、そして混合エンタルピーの大きさである。エントロピーの好ましい影響がエンタルピーの好ましくない影響より大きければ、オメガ値は大きくなる。オメガ値が大きければ、単一相として残りやすいとみなされる。

これに加え、原子サイズの差もあわせて確認する。原子サイズがあまりに異なると、格子が耐えきれずに分離してしまう。そのためサイズの差が一定値より小さくなければ、単相固溶体は形成されにくい。研究者らは、オメガ値が大ききサイズ差が小さいときに単相固溶体が形成されるという経験則を用いている。

この規則は便利であるが、決定的な手段ではない。実際の合金は局所秩序、冷却速度、不純物、熱処理の影響を受ける。同じ組成であっても、製造方法によって組織は変化する。したがって、オメガ規則は最初のスクリーニングにのみ用いられる。

正確な判断は、計算量がより多い手法が担う。代表的な手法がCALPHAD (CALPHAD) である。CALPHADは複数の相の自由エネルギーをデータとして蓄積し、相平衡を計算する手法である。ここに密度汎関数理論 (Density Functional Theory, DFT) 計算と実験が加わる。密度汎関数理論は電子の挙動からエネルギーを計算する量子計算手法である。

エンタルピーとエントロピーの力比べを身近な例に置き換えてみる。教室で男子生徒と女子生徒が混ざり合って座っているとしよう。仲の良いグループ同士で集まろうとする力がエンタルピーに似ている。席を自由に混ぜ合わせようとする力がエントロピーに似ている。静かな時間にはグループで固まる。活発な時間には自由に混ざり合う。温度が高いほど混ざり合おうとする力が強くなるのと同じである。

人工知能はこのプロセスを加速させる。オメガのような簡便な指標は、データが膨大にある場合に人工知能の入力特徴量として用いられる。人工知能はこの特徴量をもとに、どのような組成が単一相として残るかを迅速に絞り込む。そうして絞り込まれた候補のみをCALPHADや実験で確認する。この協調作業こそが、広大な組成空間を扱うための鍵となる。

最近の研究では、この予測精度が大幅に向上している。複数の物理特徴量を組み合わせて入力すると、相予測の精度は約70パーセントから90パーセントを超える水準に達する。この精度があれば、100万種を超える組成を迅速にスクリーニングできる。人工知能が人間の手間を大きく省いてくれるわけである。こうして絞り込まれた少数の候補に時間とリソースを集中させる。

4.2.2 価電子濃度で結晶構造を見極める

この小節では、合金がどのような結晶構造を持つかを推し量る指標を扱う。その指標とは価電子濃度 (Valence Electron Concentration, VEC) である。最外殻電子の平均数を意味する。まず結晶構造とは何かを確認する。金属原子は無秩序に配置されるのではない。規則的な格子として積み重なる。レンガを規則に従って積み上げるのと同じである。積み上げ方によって性質が変化する。

ロケット材料において重要な構造は二つある。一つは体心立方格子 (Body-Centered Cubic, BCC) である。立方体の8つの頂点と中心に原子が配置された構造である。もう一つは面心立方格子 (Face-Centered Cubic, FCC) である。8つの頂点と6つの面の中心に原子が配置された構造である。

これら二つの構造は性質が異なる。体心立方格子は高温強度に有利な場合が多い。その代わり、室温で脆く割れやすい脆性を示しやすい。面心立方格子はよく伸びる延性に優れる場合が多い。どのような構造が形成されるかをあらかじめ把握できれば、設計が容易になる。

価電子濃度がこの構造を推し量る指標となる。価電子は原子の外側にある電子である。この電子が結合に関与する。各元素が提供する最外殻電子数を組成比率で平均した値が価電子濃度である。この値が結晶構造の方向性を示してくれる。

経験則は次の通りである。この値がおよそ6.87より小さければ体心立方格子が安定である。8より大きければ面心立方格子が安定である。その中間では二つの構造が混在する。難溶性ハイレントロピー合金はこの値が小さいため体心立方格子が多い。有名なカントール合金はこの値が大きいため面心立方格子となる。

この規則の有用性は、最近の人工知能研究でも確認できる。2026年初頭に公開されたあるプレプリント研究がある。プレプリント研究とは査読を経ていない初期の研究である。この研究では難溶性ハイレントロピー合金の融点を予測した。結晶構造を直接入力せず、元素組成から得られた特徴量のみを用いた。価電子濃度のように物理的な意味を持つ特徴量が予測に大きく寄与した。人間が蓄積した物理知識と人工知能が選定した特徴量が互いに合致した形である。

この事例は二つのことを示している。一つは、簡便な指標が現在でも有用であるという点である。もう一つは、人工知能が物理法則と矛盾することなく学習できるという点である。これら二つの視点が、本章全体を貫く基本的な考え方である。

ここで、なぜ構造が性質を左右するのかについてももう少し詳しく確認する。変形は転位が格子内をすべることによって生じる。面心立方格子には原子が密に並んだ面が存在するため、転位が滑らかに通過する。そのため伸びやすく、割れにくい。体心立方格子にはそうした最密面が存在しない。すべり面の数が少ないからではなく、転位が通過するために乗り越えるべきエネルギー障壁が大きいためである。この障壁は温度に対して敏感である。そのため体心立方格子は室温では脆く割れやすいが、温度が上がると転位が動きやすくなり、強度を維持する。

この違いはロケット材料の選定にそのまま直結する。ノズルライナーにおいては何よりも高温強度が重要である。そのため体心立方格子系の難溶性ハイレントロピー合金が候補となる。その反面、室温脆性という弱点も併せ持つ。この弱点を緩和するためには組成を精密に調整しなければならない。価電子濃度はその調整における最初の羅針盤となる。

ただし、価電子濃度の規則にも限界がある。6.87と8という境界は、特定の遷移金属合金群から得られた経験値である。他の合金群にはそのまま当てはまらない。この値は平均値であるため、局所的な環境を捉えることもできない。同じ平均値であっても、元素の組み合わせによって実際の構造が異なる場合がある。さらに、この規則は硬くて脆い金属間化合物がいつ生成するかまでは教えてくれない。ラーベス相やシグマ相がその例である。こうした相が混入すると合金は脆くなる。したがって、この指標も初期のスクリーニングに用い、精密な計算によって確認する。人工知能はこのスクリーニングをはるかに迅速かつ広範囲に実行してくれる。

4.3 論文テキストから材料の特徴量を抽出する

人工知能は金属を目で直接見ることはできない。数値化された特徴を通してのみ材料を認識する。この特徴量を記述子 (Descriptor) と呼ぶ。本節では、論文のテキストからこの特徴量を抽出する手法を見ていく。まず組成空間がどれほど広大であるかを確認する。元素を5種類以上混ぜ合わせ、各比率を変化させると組み合わせの数は爆発的に増加する。コーヒーに入れる材料が2種類であれば組み合わせはわずかである。しかし材料が10種類になれば組み合わせは数え切れないほどになる。多成分合金はまさにそのような状態である。

この広大な空間を実験によって網羅することは不可能である。合金を一つ作製し試験するだけでも時間と費用がかかる。CALPHAD計算も組成ごとに時間を要する。そのため、広大な空間を迅速に絞り込む案内役が必要となる。人工知能こそがその案内役である。

人工知能を活用するには、材料を数値に変換しなければならない。記述子はその数値である。原子半径、電気陰性度、融点、最外殻電子数が代表的な記述子である。電気陰性度は原子が電子を引き寄せる強さである。このような値を組成に合わせて算出し、人工知能に入力する。

問題は、こうした数値だけでは不十分である点にある。同じ組成であっても、どのように製造したかによって性質は大きく異なる。熱処理温度、保持時間、冷却方法が組織を変化させる。こうしたプロセス情報は単一の数値では表現しにくい。しかし、論文にはこの情報がテキストとして記述されている。

自然言語由来記述子 (Natural language-derived descriptor) がこの隙間を埋める。これは、論文の文章を人工知能が読み取り、特徴量へと変換したものである。人間が読む文章を機械が解釈できる数値へと変換するわけである。最近の研究では、この手法によってプロセスの説明まで特徴量に組み込んでいる。

2026年に公開されたあるプレプリント研究が良い例である。米国ペンシルベニア州立大学の研究チームによる成果である。彼らは熱処理プロセスを説明した文章を大規模言語モデルに入力した。その文章の数値表現から、元のプロセス値をほぼそのまま復元することができた。そしてこの表現を特徴量として用いることで、合金の硬度予測精度を約20パーセント向上させた。この研究はまだ査読を経ていない初期の研究である。

文献マイニングは、こうした特徴量を大規模に収集する作業である。膨大な金属関連の論文から相変態温度、固溶限、強度、延性の値を自動で抽出する。かつては人間が手作業で表を作成していた。現在では大規模言語モデルが文章を読み取り、表を埋めていく。そうして収集されたデータが、人工知能の学習基盤となる。

言語モデルを物性予測に直接適用した研究もある。2025年の学術誌に掲載された成果である。この研究ではTransformerと呼ばれる言語モデル構造を採用した。Transformerは文章内の単語の関係性を読み解く人工知能である。合金の組成と条件をテキストのように扱い、物性を予測した。自然言語を扱っていた技術が材料研究へと応用された事例である。

最近では、大規模言語モデルを用いてハイエントロピー合金データベースを構築した研究も発表されている。2026年の学術誌に掲載された成果である。このデータベースは、論文から組成と物性を自動的に整理したものである。手作業では膨大な時間を要した作業を大幅に短縮した。このように蓄積されたデータは、次節で解説する予測モデルの基盤となる。

この方法にも限界がある。論文ごとに測定条件や表記方法が異なる。機械が文章を誤読すると、誤った値がデータに混入する。そのため、収集したデータを人間が再検討しなければならない。人工知能が収集し人間が確認する協業が、現在の標準である。

データの質が予測の質を決める。誤ったデータで学習すれば誤った答えが出る。設計図が間違っていれば、腕の良い大工でも頑丈な家は建てられない。そのため、データを収集する段階が予測と同じくらい重要である。質の高いデータが良い人工知能の基盤となる。

最近では人工知能が自ら規則を拡張することもある。2026年の学術誌に掲載されたある研究は、知識補強型の人工知能フレームワークを提案した。この研究は、元素を同量で混合しなければならないという制約から脱却した。目的に応じて元素の比率を自由に変え、単相ハイエントロピー合金を設計した。人間が蓄積してきた冶金学の知識を人工知能に統合して得られた成果である。

このような流れは、人工知能と人間の知識の協業を示している。人工知能だけを用いれば、データの範囲外で不安定になる。人間の規則だけを用いれば、広大な空間を探索することが難しい。両者を組み合わせることで互いの弱点を補い合える。文献マイニングと知識補強が相まってこそ、設計が堅牢になる。

CALPHADとの結合も重要である。人工知能はCALPHAD計算を高速に模倣したり、次の計算候補を選定したりすることができる。文献から収集したデータ、CALPHAD計算、密度汎関数理論 (DFT)、実験を一つに統合すれば、候補の設計が加速する。この統合パイプラインこそが、広大な組成空間を扱う現実的なアプローチである。

4.4 無秩序な合金を表現するグラフニューラルネットワーク

ハイエントロピー合金の無秩序性を人工知能がどのように表現するのかを見ていく。中核となるツールはグラフニューラルネットワーク (Graph Neural Network, GNN) である。材料を点と線の図に変換して学習する方法だ。まずグラフとは何かを確認する。グラフとは点と線で関係を表した図である。地下鉄の路線図がグラフ

に当たる。駅が点であり、線路が線だ。結晶もグラフとして描くことができる。原子が点であり、原子間の結合が線となる。

グラフニューラルネットワークはこの図を読み取り、材料の性質を予測する。各点は原子の情報を保持する。各線は原子間の距離と方向を保持する。ニューラルネットワークは隣接する点同士で情報をやり取りしながら材料を理解する。この情報交換をメッセージパッシング (Message passing) と呼ぶ。隣の席の友人とメモをやり取りしてクラス全体の雰囲気把握するようなものだ。

この方法は理想的な単結晶によく適合する。単結晶は各サイトに一つの元素だけがきっちり収まった結晶である。塩の結晶のように規則性が明確だ。従来の結晶グラフニューラルネットワークはこのような前提で作られた。各点に一つの元素を割り当てれば計算が明快になる。

問題は、ハイエントロピー合金がそうではない点にある。この合金では、一つのサイトに複数の元素が確率的に混ざり合う。あるサイトがニオブであることもあれば、モリブデンであることも、タンタルであることもある。これを部分占有 (Fractional occupancy) と呼ぶ。一つのサイトが複数の可能性を同時に持っている状態だ。

ここに局所短範囲秩序 (Short-Range Order, SRO) も存在する。原子は完全に無作為に混ざり合うわけではない。特定の元素同士は隣り合うことを好み、特定の元素同士は避け合う。この近距離での選好が性質に大きな影響を与える。従来のモデルでは、この微細な秩序を捉えきれない。

結晶分数グラフニューラルネットワークは、この問題を解決しようとする試みである。この方向性の考え方は次のとおりだ。各点に単一の元素ではなく組成ベクトルを入力する。組成ベクトルとは、各元素がそのサイトに存在する確率を記した数値のリストである。例えば、あるサイトをニオブ25パーセント、モリブデン25パーセント、タンタル50パーセントとして表現する。こうすることで、部分占有を自然に組み込むことができる。

この名が付けられた先行研究が実際に示した範囲は限定的で明確である。その研究は、原子16個程度の局所環境と合金全体の元素分率を共に入力し、結晶のエネルギーを予測した。約1,000個の構造で学習した結果である。短範囲秩序、融点、混合エンタルピー、高温強度までを一度に予測した研究ではない。これらの性質を統合して予測することは今後の課題であり、すでに達成された成果ではない。線に元素対の情報を付加して短範囲秩序を組み込む手法も、同様に提案段階にある。

メッセージパッシングがどのように学習につながるのかを確認する。初めは各点が自身の情報しか持たない。一度情報をやり取りすると隣接点まで把握する。これを何度も繰り返すと、より遠くの情報まで把握できるようになる。このように拡張された情報を用いて材料全体の性質を予測する。予測が実際の値とずれていれば、ニューラルネットワークのパラメータを修正する。この修正を無数に繰り返すことで、モデルの精度が高まっていく。

一つのモデルで複数の性質を同時に予測できる点も利点である。これを多目的予測と呼ぶ。融点と強度は互いに関連している。一つの性質を学習して得た情報が、別の性質の予測を助ける。複数の科目を一緒に勉強すると相互の理解が深まるのと同様である。

ただし、この方向性はまだ初期段階にある。結晶分数グラフニューラルネットワークは、最近になって先行研究として提案されたばかりである。大規模セル、複雑な短範囲秩序、実際の熱処理履歴を扱うことは依然として困難な課題だ。そのため、このモデルによる予測は実験や原子シミュレーションによって検証する必要がある。

一方で、短範囲秩序を扱う他の人工知能研究は急速に増加している。2025年の学術誌に掲載されたある研究は、機械学習ポテンシャルを用いて短範囲秩序を再現する手法を比較した。機械学習ポテンシャルは原子間に働く力を人工知能で計算するツールである。この研究は、エネルギーの精度が高くても性質を正確に再現できない場合があることを示した。学習データをどのように選定するかが性質予測を左右するという意味である。

同年の別の研究では、人工知能によってモンテカルロ計算を加速させた。モンテカルロ法は無作為な試行によって平衡状態を探索する計算手法である。この研究は人工知能サロゲートモデルを用いて数十億個の原子規模

におけるナノ構造を明らかにした。ハイエントロピー合金内部の微細な秩序を大規模に観察する道を切り拓いたと言える。結晶分数グラフニューラルネットワークも、こうした潮流の上で発展を続けている。

なぜこのような無秩序の表現がロケット材料にとって重要なのかを確認する。ノズルライナーの強度は、転位がどれだけ効果的に阻止されるにかかっている。短範囲秩序は転位が移動する経路の難易度を変化させる。特定の元素同士が凝集すると転位をより強力に阻む。そのため、同じ組成であっても短範囲秩序によって強度が変化する。

この微細な秩序は製造方法によって変化する。急速に冷却すると無秩序な状態が凍結される。ゆっくり冷却すると原子が定位置に収まり秩序が生じる。熱処理の温度と時間も秩序を変化させる。したがって、組成だけでなくプロセスまで考慮して初めて性質を正確に予測できる。

人工知能は、この複雑に絡み合った関係を学習するために用いられる。組成、プロセス、秩序、性質を同時に結び付ける。人間がこれほど多くの変数を同時に扱うのは困難である。人工知能は十分なデータがあればその関連性を見出し出す。結晶分数グラフニューラルネットワークは、この結び付きを原子配置のレベルで捉えようとする試みである。

この方向性はまだ初期段階にある。現時点では予測の精度とデータ量の双方が不足している。実験データが蓄積され計算が高速化すれば、予測精度は向上する。それまでは、人工知能による予測を実験で検証する手続きが不可欠である。

4.5 原子一つひとつまで観察する大規模分子動力学

原子一つひとつの運動をコンピュータで模倣する手法を分子動力学（Molecular Dynamics, MD）と呼ぶ。金属が破壊される過程を原子レベルで観察するツールである。この計算を極めて大規模に拡張する鍵となるのが、神経進化ポテンシャル（Neuroevolution Potential, NEP）と呼ばれる人工知能である。まず、なぜ大規模な計算が必要なのかを確認する。金属の亀裂はわずか数個の原子から始まる。その微小な隙間が成長して結晶粒界へと広がり、最終的に構造を破断させる。この過程は、極めて微小な現象と相当に大きな現象を共に見なければ理解できない。このような現象をマルチスケール（Multi-scale）現象と呼ぶ。

従来の密度汎関数理論（DFT）では、この作業を行うことが難しい。この計算は高精度であるが計算量が膨大である。原子数百個を超える系を扱うことは困難だ。亀裂が進展する実際の組織には数十億個以上の原子が含まれる。そのため、高精度な量子計算のみでは全体像を把握することができない。

経験的ポテンシャルには逆の問題がある。ポテンシャルとは原子間に作用する力を計算する規則である。経験的ポテンシャルは計算負荷が低く高速である。しかし、5種類以上の元素を含む複雑な合金では精度が低下する。元素ごとに周囲の環境が異なるが、その微妙な差異を捉えきれないためである。

したがって、双方の手法の長所を兼ね備えたツールが必要となる。量子計算の正確さと経験的規則の高速性を併せ持つツールである。この役割を果たすのが機械学習原子間ポテンシャル（MLIP）である。人工知能が量子計算データを学習して力を予測する。神経進化ポテンシャル（NEP）は、この系統において特に速度に優れたツールである。

分子動力学とは何かについても確認しておく。この計算はすべての原子に対してニュートンの運動方程式を適用する。各原子に作用する力を求め、ごく短い時間ステップだけ移動させる。このプロセスを無数に繰り返す。そうすることで、原子が時間経過とともにどのように運動するかを動画のように観察できる。

4.5.1 正確性と速度を両立する神経進化ポテンシャル

神経進化ポテンシャルは二つの発想を融合したツールである。一つはニューラルネットワークである。ニューラルネットワークはデータから規則を学習する人工知能だ。もう一つは進化戦略である。進化戦略は複数の候補を生成し、より優れたものを選択して改良していく手法である。自然淘汰を模倣した学習法だ。

このポテンシャルは、まず原子の周囲環境を数値に変換する。特定の原子が隣接原子とどれほど離れており、どのような角度で配置されているかを特徴量とする。この特徴量をニューラルネットワークに入力し、単一原子のエネルギーを予測する。すべての原子のエネルギーを合算することで全エネルギーが求められる。そして、エネルギーの変化から原子に作用する力を導出する。

なぜ距離と角度を共に考慮するのかを確認する。距離だけを見れば原子がどれほど近接しているかしか分からない。角度まで考慮して初めて、原子がどのような幾何学的形状で配置されているかが分かる。同じ距離であっても、三角形の配置と直線上の配置では性質が異なる。そのため、距離と角度の双方を入力してこそ環境を正しく表現できる。

この方式は化学結合の本質に通じている。原子は周囲の環境に応じて異なる結合を形成する。隣接原子が稠密であれば結合は強くなり、疎であれば弱くなる。神経進化ポテンシャルはこの関係性をデータから学習する。学習した関係性に基づいて、新たな配置のエネルギーを迅速に推定する。

この方式の利点は、正確性と速度を両立させている点にある。ニューラルネットワークは量子計算に近い精度を学習する。計算自体は経験的規則と同等に軽量である。したがって、正確な力を高速に得ることができる。これが大規模計算を可能にする鍵である。

速度の秘訣はグラフィックス処理装置（Graphics Processing Unit, GPU）にある。この装置は本来、ゲーム画面を描画するために開発された。画面上の無数のピクセルを同時に描くことに長けている。この並列処理能力が原子計算にも極めて適している。無数の原子に働く力を一括して計算できるからである。

神経進化ポテンシャルは、この装置上で効率的に動作するよう設計されている。GPUMDと呼ばれるGPU用プログラムと共に使用される。この組み合わせは、熱伝導、欠陥、高温変形の研究に広く利用されてきた。最近では学習アルゴリズムをさらに高速化した後続研究も発表されている。このような改良が、より大規模な計算を可能にする。

このポテンシャルを構築するプロセスについても確認しておく。まず密度汎関数理論（DFT）を用いて多様な原子配置のエネルギーと力を計算する。この値が人工知能の教科書となる。人工知能はこの教科書を参照しながら自身の予測を洗練させる。進化戦略は、予測がデータとよく一致する方向へとパラメータを最適化していく。この学習が完了すれば、高速かつ高精度な力の計算器が完成する。

学習には能動学習（Active Learning）が併用される。人工知能が確信を持ってない配置を自ら検出する。その配置のみを選び出し、密度汎関数理論（DFT）で新たに計算を行う。こうして得られたデータを再び学習に投入する。少ない計算量で広範な領域をカバーする効率的な手法である。

ただし、迅速な答えが常に正しい答えとは限らない。人工知能ポテンシャルは学習した範囲内において正確である。学習データに含まれていない組成や温度領域では誤った予測をする可能性がある。ハイエントロピー合金は、元素の組み合わせがわずかに変わるだけでも環境が大きく変化する。そのため、学習データの代表性が何よりも重要となる。予測の不確実性を別途検証するプロセスが必要である。

4.5.2 大規模計算で捉える変形と亀裂

1兆は想像しがたい数である。1兆個の原子を並べると、実際の組織に近い大きさになる。マイクロメートル単位の試験片を原子一つひとつまで描画できるという意味だ。小規模な計算では単一の亀裂や少数の粒界しか見えない。大規模な計算では、多数の粒界や欠陥が互いに影響を及ぼし合う様子を捉えることができる。

2026年に公開されたあるプレプリント研究がこの敷居を越えた。この研究は神経進化ポテンシャルにより1兆6000億原子を計算した。中国の新しいスーパーコンピュータで約4万5000個の計算装置を併用した。この研究が示したのは計算規模と速度である。同じ計算を以前の最高記録よりはるかに高速に実行したと報告している。この規模でハイエントロピー合金の転位や亀裂を実際に解析した結果を出した研究ではない。規模を切り開く実演と、その規模で何を明らかにするかは別の問題である。この研究はまだ査読を経っていない初期研究である。

この数字がどのような意味を持つのか、少し比較してみる。かつては原子100万個の計算でも大仕事だった。数年前に1億個を超え、やがて100億個に達した。今や1兆個を超えている。計算できる規模が急速に拡大している。ただし、1兆原子の計算は超大型スーパーコンピュータを限界まで使った象徴的な実演である。実際の合金設計で日常的に使われる計算は、原子数千個から数十万個の規模である。人工知能ポテンシャルと高速なコンピュータがこの成長を牽引している。

大規模がもたらす利点は統計にある。原子が多いほど、稀な事象も捉えられる。亀裂の種はごく稀に生じる。小規模な計算ではその種を見逃すことがある。大規模な計算では、複数の種を同時に観察できる。それだけ予測が現実になづく。

この計算がロケット材料になぜ有用であるのかをまず確認する。実際のノズルライナーの組織には、数え切れないほどの原子が存在する。この巨大な組織で何が起きているかを知ってこそ寿命がわかる。大規模な計算は、この実際の組織に近い像を提供する。そのため、どの組成が長く耐えうるかを見極めるのに用いることができる。

このような大規模な分子動力学によって原理上観察できる事象は3つある。以下はこの手法が目指す目標であり、先の実演がすでに解明した結果ではない。第1は転位の核生成である。転位とは変形が始まる微小な欠陥である。体心立方格子において転位がどのように生じ、どのようにすべるかをリアルタイムで追跡する。ハイエントロピー合金では、局所的な組成の揺らぎが転位を捕捉する。この捕捉こそが強度を高める原理である。

第2は結晶粒界すべりである。結晶粒界とは結晶粒同士の境界である。高温で力を受けると、この境界がすべる。大規模な計算は、このすべりと空孔の凝集を原子レベルで測定する。この挙動がクリープ寿命を左右する。

第3は亀裂の進展である。亀裂先端とは割れ目の最前部である。ここで原子配列が変化し、変形が起こる。大規模な計算は、亀裂がどのように成長し、どのように停止するかを捉える。どのような組成が亀裂によく耐えるかを見極める手がかりとなる。

これら3つの事象は互いにつながっている。転位が蓄積して結晶粒界へと集まる。結晶粒界がすべることで空孔が生じる。その空孔がつながって亀裂となる。小規模な計算ではこの連鎖を捉えることが難しい。大規模な計算では、最初から最後までを一望に収めることができる。

この連鎖を見ることがなぜ有用であるのかを確認する。材料の寿命は、たった一つの弱い輪によって決まる。鎖は最も弱い輪から切れる。どの段階が先に崩れるかがわかれば、そこを補強できる。大規模計算は、この弱い輪がどこにあるのかをあらかじめ見つけ出すのに役立つ。

この情報はロケットのノズルライナー研究に有用である。ノズルライナーは高温ガスと熱衝撃を同時に受ける。どの組成が長く耐えうるかを実験前に見極めることができれば、時間を節約できる。大規模計算は候補を絞り込む天秤の役割を果たす。

ただし、この計算にも条件がつく。結果の正確性は人工知能ポテンシャルの質にかかっている。ポテンシャルが学習していない状況では計算も誤る。そのため、大規模計算の結果は、小規模な精密計算や実験によって検証しなければならない。規模が大きいことと正しいことは別の問題である。

4.6 物理法則と矛盾しない金属設計人工知能

純粋なデータ学習だけでは危険な予測が生じかねない。その危険を物理法則によって防ぐ手法を物理情報ニューラルネットワーク（Physics-Informed Neural Network, PINN）と呼ぶ。冶金学、すなわち金属を扱う学問にこの手法をどのように適用するかを見る。まず純粋なデータ学習の弱点を確認する。人工知能は学習したデータの中では適切に答える。しかし、データが存在しない領域では見当違いな答えを出す。このような領域を分布外（Out-of-Distribution）と呼ぶ。試験範囲外の問題に直面した生徒のようなものである。

金属設計において、この見当違いな答えは物理法則に反する。例えば、温度が上昇しているのに安定性の値が逆に動く。体積が増えているのに格子エネルギーが減少すると予測することもある。このような答えは自然界では起こり得ない。このような予測をそのまま信じれば、設計は破綻する。

物理情報ニューラルネットワークは、この問題を学習段階で防ぐ。その手法は損失関数に物理法則を組み込むことである。損失関数とは、人工知能がどれほど間違っているかを測る尺度である。通常は予測と実際のデータとの差のみを測る。ここに物理法則に違反した度合いを加える。

こうすることで、人工知能は2つのことを同時に守ろうとする。1つはデータに合わせることである。もう1つは物理法則を守ることである。データが存在しない領域でも、法則が答えの方向性を定めてくれる。試験範囲外の問題であっても基本原理で解いてみる生徒のようなものである。

金属設計ではどのような法則を組み込むのだろうか。自由エネルギーが温度に応じてどのように変化すべきかがその一例である。強度が複数の強化寄与の和として決まるという関係も組み込む。相平衡が満たすべき条件も組み込む。これらの法則が人工知能の自由度を制限する。制限された自由度が、かえって信頼できる答えを生み出す。

損失関数に法則を組み込む方法をもう少し詳しく解説する。物理法則は通常、方程式として記述される。予測値をその方程式に代入すると、両辺が一致しなければならない。一致しなければその差が生じる。この差を残差と呼ぶ。残差が大きい場合にペナルティを与える方式である。

こうすることで、人工知能はペナルティを避けようと努める。データに適合させながら、方程式も守ろうとする。試験の答案を提出する際に、計算式や単位まで合わせる生徒のようなものである。答えだけを暗記した生徒よりも応用問題に強い。物理情報ニューラルネットワークがデータの外側でも頑健である理由がここにある。

この手法の価値はデータが少ないときに高まる。ロケット用の極限材料は実験データが貴重である。1回の試験に多大な費用と時間がかかる。データが少なければ、純粋な学習は容易に揺らぐ。物理法則が不足しているデータを補完してくれる。

これら2つの手法は区別しなければならない。前節で見た融点予測の研究は物理情報ニューラルネットワークではない。その研究は、物理的に意味の通る特徴量を選び出して組み込んだ回帰モデルである。損失関数に物理方程式を直接組み込んだわけではない。適切な特徴量を用いる回帰と、物理法則を損失関数に組み込む学習は異なる手法である。ただし、双方は同じ目標に向かっている。人工知能の予測が冶金学と矛盾しないようにすることである。優れた特徴量と物理的制約が共にあるとき、その目標にいつそう近づく。

4.6.1 超高温ノズルライナー設計にツールを結集する

本小節では、前述のツール群が実際の設計においてどのように連携して用いられるかを見る。目標は、超高温ノズルライナーに用いる難融性ハイレントロピー合金である。単一の完成された成果よりも、設計と検証の手順に重きを置く。最近の研究がどこまで到達し、何が課題として残されているかも確認する。優れたノズルライナー合金は、複数の特性を同時に満たさなければならない。融点が高くなければならない。密度が大きすぎるとロケットが重くなる。高温下でも強度が維持されなければならない。酸素と接触しても表面が十分に耐えなければならない。コーティングと熱膨張が適切に整合しなければならない。単一の特性が優れているだけでは、部品として使用できない。

これら複数の目標を同時に達成することは、人間には荷が重い。タングステンを多く添加すれば融点は上がる。しかし密度が大きくなり、脆くなりやすい。アルミニウムやクロムを添加すれば耐酸化性は向上する。しかし他の特性が損なわれる可能性がある。このように互いに絡み合った目標を扱うことを多目的最適化と呼ぶ。

ロケットにおいて密度は極めて繊細な問題である。部品が重くなればロケット全体が重くなる。重いロケットは同じ燃料で飛行できる距離が短くなる。そのため、強度に優れていても重すぎれば使用できない。融点と強度、そして重量を同時に天秤にかけなければならない。

このような天秤にかける作業には、単一の正解が存在しない。強度を多少妥協すれば重量を減らすことができる。重量を多少妥協すれば強度を高めることができる。このように互いにトレードオフの関係にある候補群が導き出される。この候補群を前にして、人間が目的に合った一つを選択する。人工知能はこの候補群を迅速に描き出してくれる。

人工知能は、これら絡み合った目標を同時に扱う。前述の記述子（ディスクリプタ）によって組成を数値に変換する。予測モデルによって融点と強度を迅速にスクリーニングする。物理的制約によって非合理的な候補を排除する。大規模な原子計算によって変形と亀裂を精査する。この一連の流れが候補を大幅に絞り込む。

最近の研究群は、このプロセスの有用性を示している。2024年に学術誌に掲載されたある研究は、機械学習によって超高温用の難融性ハイレントロピー合金を設計した。人工知能によって広大な組成空間を絞り込み、有望な候補を選定した。強度と延性を同時に向上させようとする試みであった。このような研究は、人工知能による設計が実験室段階で機能することを示している。

酸化の問題にも人工知能が導入されている。2025年末に公開されたあるプレプリント研究がある。この研究は能動学習により、高温酸化に強い難融性多元濃縮合金を探索した。能動学習とは、人工知能が次に実験すべき組成を自ら選択する手法である。少ない実験回数で優れた候補を見出す道である。この研究もまだ査読を経していない初期研究である。

しかし、確定した成果のように語るには時期尚早である。ある組成が特定温度で正確にどれだけの強度を発揮するかという数値は、原典の確認が必要である。検証されていない性能値は本書には記載しない。代わりに本節では、設計が経るべき検証手順を強調する。

検証は3段階で行われる。まず、候補組成が計算上で安定しているかを確認する。CALPHAD法と密度汎関数理論（DFT）により相平衡を確認する。次に、実際に合金が作製可能かを見る。計算上で優れていても作製できなければ役に立たない。最後に、高温下での強度と耐酸化性を測定する。実際の環境に近い試験が最終関門となる。

これらの段階を経る際、誤差も連鎖して伝播するという点を忘れてはならない。原子計算のわずかな誤差は微細組織の予測へと波及し、さらに部品強度の予測へと拡大する。酸化によって表面が損耗し境界が移動すると、予測はさらに揺らぐ。製造プロセスごとに生じるばらつきもここに加わる。そのため、優れた設計は単一の値ではなく寿命の範囲を提示する。最終的には実部品と同条件の認定試験を経なければならない。

これら3つの段階は、単に順番通りに進むだけではない。試験で弱点が見つかれば、再び組成を修正する。修正した組成を再計算し、再作製する。このように巡り巡るプロセスを繰り返す。この循環をクローズドループ設計と呼ぶ。自律実験室はこの循環を自動で回す試みである。

人工知能はこの循環のあらゆる段階に介入する。次に試験すべき組成を選び、結果を学習し、再び選び出す。人間が夜通し見守らなくても循環は回る。それだけ優れた組成に至る道筋が短縮される。この潮流が高温合金開発の未来を変えつつある。

ニッケル基超合金の分野でも人工知能による設計が活発である。2025年の研究群は、単結晶超合金のクリープ寿命を機械学習によって予測した。組成と微細組織の情報を入力し、長期耐用に耐えうる組成を選定した。ガンマプライム相の粒子の体積分率と形状が重要な特徴量として用いられた。このような研究は、歴史ある金属に対しても人工知能が新たな有用性をもたらすことを示している。

ここでフェーズフィールド計算と人工知能を融合させた研究もある。フェーズフィールド法は組織の変化を滑らかな場として描写する計算手法である。2025年のある研究は、この計算と機械学習を連携させた。組成と組織がクリープ変形に及ぼす影響を統合的に予測した。計算科学と人工知能を連携させるこのような手法は次第に増加している。

これらの事例は共通の教訓を与えてくれる。人工知能は適切な特徴量と十分なデータが存在するときに真価を発揮する。特徴量が物理と結びついていれば予測は堅牢となる。データが特定の領域に偏っていれば、その外部では不安定になる。したがって、データを幅広く収集し、特徴量を適切に選定することが先決である。

このプロセスにおいて人工知能の立ち位置は明確である。人工知能は組成空間を縮小する案内役である。人工知能が100通りの候補を3通りに絞り込めば、人間はその3通りのみを詳細に試験する。このように役割を分担するとき、開発は迅速化し、失敗は減少する。これこそが物理法則と矛盾しない金属設計人工知能の実際の姿である。

まとめ

本章では、ロケットにおいて温度が最高潮に達する部位を守る金属を扱った。その部位とは燃焼室ノズルと再突入表面である。ここでは熱と圧力、そして応力が複合して材料に過酷な負荷をかける。

長年用いられてきたニッケル基超合金は約1,150度で限界を迎える。それを上回る温度を狙う新たな候補が耐火ハイレントロピー合金である。この合金は、融点の高い金属を複数、同等の割合で混ぜ合わせたものである。

初期の研究は、この合金の性質を4つの効果で説明した。配置エントロピー、格子歪み、遅い拡散、カクテル効果である。このうち一部は後に反論が出され、一般的な法則とみなすことは難しい。それでもこの枠組みは、どのような組成が単一相として安定して残るかを考える出発点となる。オメガパラメータと価電子濃度がその判断を助ける簡便な指標である。

広い組成空間を扱うには人工知能が必要である。人工知能は素材を記述子（ディスクリプタ）という数値として読み取る。大規模言語モデルは論文の文章からこの特徴を抽出する。グラフニューラルネットワークは素材を点と線として学習する。結晶分率グラフニューラルネットワークは、ハイレントロピー合金の無秩序を取り込もうとする新たな試みである。

原子レベルの挙動は分子動力学で捉える。神経進化ポテンシャルという人工知能がこの計算を高速化する。最近の研究は1兆個を超える原子規模に達した。この大規模な計算は、転位、結晶粒界すべり、亀裂を原子レベルで観察する。

これらすべてのツールを一つにまとめる考え方が物理一貫性である。純粋なデータ学習は物理法則に反する答えを出すことがある。物理情報ニューラルネットワーク（PINN）は損失関数に法則を組み込むことでこれを防ぐ。人工知能は候補を絞り込む案内役であり、最終判断は実験が下す。

本章の事例の大部分はまだ初期の研究である。先行研究の数値は確定した値ではない。企業の事例は産業界の事例にすぎず、学術的な実証ではない。そのため優れた設計は、常に計算と実験による確認を共に行う。人工知能が選択肢を絞り込み、人間が進路を決める協調がこの分野の現在である。

本章を一文で要約するとこうなる。人工知能は高温金属設計の速度を変える。以前は1つの候補を試験するのに長い時間がかかった。現在は人工知能が数多くの候補を事前にふるい分ける。残った少数のみを精密計算と試験で確認する。

今後の課題も明確である。実験データをより広く偏りなく集めなければならない。人工知能による予測の不確実性を併せて提示しなければならない。物理法則をより緻密に学習へ組み込まなければならない。この3つが整うほど、ロケット材料の設計は加速する。

関連根拠資料

- Yeh, J. W., Chen, S. K., Lin, S. J., Gan, J. Y., Chin, T. S., Shun, T. T., Tsau, C. H., & Chang, S. Y. (2004). Nanostructured high-entropy alloys with multiple principal elements: Novel alloy design concepts and outcomes. *Advanced Engineering Materials*, 6(5), 299-303. <https://doi.org/10.1002/adem.200300567>
- Cantor, B., Chang, I. T. H., Knight, P., & Vincent, A. J. B. (2004). Microstructural development in equiatomic multicomponent alloys. *Materials Science and Engineering A*, 375-377, 213-218. <https://doi.org/10.1016/j.msea.2003.10.257>
- Senkov, O. N., Wilks, G. B., Miracle, D. B., Chuang, C. P., & Liaw, P. K. (2010). Refractory high-entropy alloys. *Intermetallics*, 18(9), 1758-1765. <https://doi.org/10.1016/j.intermet.2010.05.014>
- Senkov, O. N., Wilks, G. B., Scott, J. M., & Miracle, D. B. (2011). Mechanical properties of Nb₂₅Mo₂₅Ta₂₅W₂₅ and V₂₀Nb₂₀Mo₂₀Ta₂₀W₂₀ refractory high entropy alloys. *Intermetallics*, 19(5), 698-706. <https://doi.org/10.1016/j.intermet.2011.01.004>
- Zhang, Y., Zuo, T. T., Tang, Z., Gao, M. C., Dahmen, K. A., Liaw, P. K., & Lu, Z. P. (2014). Microstructures and properties of high-entropy alloys. *Progress in Materials Science*, 61, 1-93. <https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2013.10.001>
- Miracle, D. B., & Senkov, O. N. (2017). A critical review of high entropy alloys and related concepts. *Acta Materialia*, 122, 448-511. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2016.08.081>
- George, E. P., Raabe, D., & Ritchie, R. O. (2019). High-entropy alloys. *Nature Reviews Materials*, 4(8), 515-534. <https://doi.org/10.1038/s41578-019-0121-4>

- Rao, Z., Tung, P. Y., Xie, R., Wei, Y., Zhang, H., Ferrari, A., Klaver, T. P. C., Kormann, F., Sukumar, P. T., da Silva, A. K., Chen, Y., Li, Z., Ponge, D., Neugebauer, J., Gutfleisch, O., Bauer, S., & Raabe, D. (2022). Machine learning-enabled high-entropy alloy discovery. *Science*, 378(6615), 78-85. <https://doi.org/10.1126/science.abo4940>
- Raissi, M., Perdikaris, P., & Karniadakis, G. E. (2019). Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations. *Journal of Computational Physics*, 378, 686-707. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2018.10.045>
- Fan, Z., Zeng, Z., Zhang, C., Wang, Y., Dong, H., Chen, Y., & Ala-Nissila, T. (2021). Neuroevolution machine learning potentials: Combining high accuracy and low cost in atomistic simulations and application to heat transport. *Physical Review B*, 104, 104309. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.104.104309>
- Fan, Z., Wang, Y., Ying, P., Song, K., Wang, J., Wang, Y., Zeng, Z., Xu, K., Lindgren, E., Rahm, J. M., Gabourie, A., Liu, J., Dong, H., Wu, J., Chen, Y., Zhong, Z., Sun, J., Erhart, P., Su, Y., & Ala-Nissila, T. (2022). GPUAMD: A package for constructing accurate machine-learned potentials and performing highly efficient atomistic simulations. *Journal of Chemical Physics*, 157, 114801. <https://doi.org/10.1063/5.0106617>
- He, Q., Wu, D., Wang, H., et al. (2024). Machine learning assisted design of refractory high-entropy alloy for ultrahigh temperature applications. *Materials & Design*, 246, 113326. <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2024.113326>
- Divilov, S., et al. (2024). A comparative study of predicting high entropy alloy phase fractions with traditional machine learning and deep neural networks. *npj Computational Materials*, 10, 68. <https://www.nature.com/articles/s41524-024-01335-1>
- Hasnain, M. (2026). Physically Consistent Machine Learning for Melting Temperature Prediction of Refractory High-Entropy Alloys. *arXiv プレプリント (査読前)*, arXiv:2601.03801. <https://arxiv.org/abs/2601.03801>
- Suo, P., Cao, W., Wu, X., Zhang, W., Fan, Z., Xian, S., et al. (2026). Trillion-atom molecular dynamics simulations with ab initio accuracy. *arXiv プレプリント (査読前)*, arXiv:2604.24816. <https://arxiv.org/abs/2604.24816>
- Hsiao, L. C., Liu, Z. K., & Reinhart, W. (2026). Modeling High Entropy Alloys' Mechanical Property through Natural Language-Derived Descriptors. *arXiv プレプリント (査読前)*, arXiv:2604.21807. <https://arxiv.org/abs/2604.21807>
- Kotama, T., & Huang, Y. (2026). Crystal Fractional Graph Neural Network for Energy Prediction of High-Entropy Alloys. *arXiv プレプリント (査読前)*, arXiv:2605.08103. <https://arxiv.org/abs/2605.08103>
- Bejjipurapu, A., Karumuri, S., Flanagan, J. C., Tucker, V., Bilonis, I., Strachan, A., Sandhage, K. H., & Titus, M. S. (2025). Active Learning Discovery of High Temperature Oxidation Resistant Refractory Complex Concentrated Alloys. *arXiv プレプリント (査読前)*, arXiv:2512.15958. <https://arxiv.org/abs/2512.15958>
- Cao, Y., Sheriff, K., & Freitas, R. (2025). Capturing short-range order in high-entropy alloys with machine learning potentials. *npj Computational Materials*, 11, 268. <https://doi.org/10.1038/s41524-025-01722-2>
- Liu, X., Yang, K., Liu, Y., Zhou, F., Fan, D., Pei, Z., Xu, P., & Tian, Y. (2025). Revealing nanostructures in high-entropy alloys via machine-learning accelerated scalable Monte Carlo simulation. *npj Computational Materials*, 11, 267. <https://doi.org/10.1038/s41524-025-01762-8>
- Huang, H., Yu, Y., Deng, W., Qian, Q., & Zheng, H. (2026). Breaking equiatomic constraints: knowledge-enhanced AI framework for function-oriented single-phase high-entropy alloy design. *npj Computational Materials*, 12, 209. <https://doi.org/10.1038/s41524-026-02071-4>
- Kamnis, S., & Delibasis, K. (2025). High entropy alloy property predictions using a transformer-based language model. *Scientific Reports*, 15, 11861. <https://doi.org/10.1038/s41598-025-95170-z>
- Chizhevskiy, V., Markovič, G., Benrazzouq, S., Cvelbar, U., Nominé, A., & Zavařnik, J. (2026). High Entropy Alloys Database generated with Large Language Model. *Scientific Data*, 13, 612. <https://doi.org/10.1038/s41597-026-06930-z>
- Yao, J., Yu, W., Wang, J., Zhang, L., Liu, F., Li, W., Tan, L., Huang, L., & Liu, Y. (2025). Integrating Machine Learning and Thermodynamic Descriptors for Enhanced Ni-Based Single Crystal Superalloys Creep Life Prediction and Alloy Design. *Metals and Materials International*, 31, 2730-2748. <https://doi.org/10.1007/s12540-025-01906-x>
- Song, J., Shan, Y., Zhang, Z., Wang, S., Zhang, H., Muhammad, S., Huang, H., & Li, Y. (2025). Phase-field-informed machine learning on creep behavior of Ni-based single-crystal superalloys. *Journal of Materials Informatics*, 5, 2. <https://doi.org/10.20517/jmi.2025.02>

第5章 航空宇宙用複合材料（CMC）および超高温セラミックス（UHTC）の微細構造制御と加熱寿命評価

はじめに

陶磁器の器は熱いオーブンに入れても溶けない。しかし、熱い器を冷水にすぐ浸すとひびが入る。熱には強いが、急激な温度変化や衝撃には弱いためである。ロケットや極超音速飛行体の表面を守る材料も、この二つの性質の間で答えを探す。ただし、その温度と力は台所とは比較にならない。

ロケットエンジンの燃焼室内部は数千度の高温ガスで満たされる。極超音速飛行体の先端部は空気と衝突して自ら熱を帯びる。このような場所の表面は、熱、酸化、摩耗、大きな力を一手に受ける。酸化とは、酸素が材料と反応して材料を侵食する現象である。

金属は強固だが、非常に高い温度では軟化する。水あめの棒が手の中で曲がるのに似ている。そのため研究者らはセラミックスに目を向ける。セラミックスは陶磁器のように熱に強く、高温でもよく耐える。

本章で扱う二つの材料は、セラミックス基複合材料（CMC）と超高温セラミックス（UHTC）である。セラミックス基複合材料は、セラミックス母材の中に細い繊維を入れて作る。超高温セラミックスは、融点が非常に高いセラミックスである。どちらも高温環境下で形状を保つことを目指している。

問題は、これらの材料がいつ破損するかを事前に把握することが難しい点である。実際の飛行環境を実験室でそのまま再現することは困難である。1回の試験にかかる費用も大きい。そこで、この難しさを軽減するツールとして人工知能（AI）が登場する。

人工知能は、材料内部の微小構造を読み取り、寿命を予測するために用いられる。微小構造とは、顕微鏡で見える粒子、繊維、気孔、粒界の形状である。本章では、この微小構造をどのように数値に変換し、どのように将来を見通すかを一つずつ説明する。数式は使わず言葉で解き明かす。

本章には一つの大きな流れがある。材料の微小な世界を数値へと変換することである。顕微鏡写真、結晶方位、原子の振動がすべて対象となる。これらの情報を人工知能が読み取れる形式へと変換する。そうすれば、人工知能が将来を見通し、構造を創り出す。

本章の構成は次の通りである。まず、極限環境において材料がどのように損傷するかを見る。次に、結晶粒をグラフに変換して寿命を予測する方法を見る。続いて、繊維の織り構造を逆設計する方法を見る。最後に、微小な世界の熱の流れと部品全体の熱の流れを繋ぐ方法を見る。

一つの原則をあらかじめ明らかにしておく。本章の人工知能は試験の代わりにはならない。人工知能が算出した性能の数値は実物で確認しなければならない。確認されていない数値は参考にすぎない。本書は検証されたデータのみを本文に掲載する。この原則が材料開発において安全を守る基盤となる。

5.1 極超音速飛行および次世代ロケット推進の極限環境と熱構造体の劣化メカニズム

本節で扱うこと

本節では、材料が耐えなければならない環境がどれほど過酷であるかをまず描く。極超音速で飛行する飛行体や高圧ロケットエンジンの内部を例に挙げる。なぜ通常の金属では駄目なのか、なぜセラミックスが必要なのか、その理由を明らかにする。

次に、セラミックス材料が実際にどのように損傷するかを見る。炭素繊維複合材の酸化、超高温セラミックスの融食と相変態を順に考察する。融食は高温ガスによって表面が溶けたり削り取られたりする現象である。この損傷過程を把握してこそ、次節の人工知能による予測が何を学習するのかを理解できる。

5.1.1 非平衡空力加熱および高エンタルピー燃焼ガス環境

空力加熱は、高速飛行によって空気が表面を加熱する現象である。表面との摩擦も熱を加える。しかし、極超音速では空気が強く圧縮されて加熱される割合の方が大きい。速度が速いほどこの熱は急激に増大し、表面を加熱する。

極超音速とは、音速の5倍を超える速度である。マッハ7ならば音速の7倍速い速度である。この速度では空気は通常のように流れない。飛行体の前方に衝撃波が発生する。衝撃波とは、空気が急激に圧縮されて生じる薄い圧力の壁である。

衝撃波を通過した空気は、瞬時に減速して高温になる。温度が極めて高くなると空気分子が解離する。酸素分子と窒素分子が個々の原子へと分解される。このように解離した原子状酸素は通常の酸素よりも反応性が高く、材料をより激しく侵食する。

飛行体において熱を他のどこよりも激しく受ける部位は、前縁と機首部である。前縁とは、翼が空気に最初に衝突する縁である。機首部は飛行体の尖った先端部である。この部位の表面は数千度まで上昇する。ここに表面を横方向に押し流すせん断力までもが重なって作用する。

ロケットエンジンの内部も同様に過酷である。メタンと液体酸素を燃焼させると高温のガスが発生する。このガスには水、二酸化炭素、一酸化炭素が混ざっている。未反応の酸素も存在する。燃焼室の圧力は数十気圧に達する。この高圧ガスが燃焼室の壁面を絶え間なく叩きつける。

このような環境を高エンタルピー環境と呼ぶ。エンタルピーとは、気体を持つ熱エネルギーの量である。高エンタルピーとは、気体が極めて多くの熱を保持していることを意味する。このガスは壁面に熱を注ぎ込む。ただし、壁面温度はガス温度よりも低い。熱が材料の内部へと拡散し、冷却も行われるためである。

ここに時間までもが問題となる。ロケットは打ち上げから軌道到達まで数百秒間燃焼する。極超音速飛行体は長時間にわたり大気圏を滑空する。短時間ではなく長時間にわたって熱を受けるという意味である。したがって、材料は一時的に耐えるだけでは不十分である。

どれほど高温であるか感覚をつかんでみよう。極超音速の前縁のよどみ点は材料の限界に近い。よどみ点とは、流れが停止して熱が最も集中する場所である。この場所の熱負荷は台所のガス火とは比較にならない。表面を横に押すせん断力もこの場所に同時にかかる。

これらすべての条件に一つの材料が耐えなければならない。熱、酸化、せん断力、長時間の暴露が重なる。2024年に極超音速飛行用材料を整理した総説は、この複合環境を材料選定の核心的な難題として挙げている。この難題がセラミックス材料研究の出発点である。

人工知能がここで果たすべき役割は明確である。実際の試験は高価で頻繁には行えない。そのため、数回の試験データから広範な条件を見通さなければならない。人工知能は少量のデータから規則性を抽出することに長けている。ただし、物理法則の助けがなければ的外れな答えを出す。本章の多様な手法が物理と人工知能を併用する理由がここにある。

5.1.2 炭素繊維複合材が酸素によって損傷する過程 (C/SiC)

炭素繊維強化炭化ケイ素 (C/SiC) は代表的な熱構造材料である。炭素繊維は細く軽量でありながら破断しにくい。炭化ケイ素 (SiC) は高温と酸化に比較的よく耐える。この二つを組み合わせると、軽量かつ強固な複合材となる。本材料は以下においてC/SiCと表記する。

この材料を製造する方法は大きく分けて二つある。一つは化学気相浸透法である。ガスを浸透させて繊維の間にセラミックスを充填する。もう一つは液相樹脂浸透炭化法である。樹脂を含浸させて焼成し、セラミックスへと変換する。どちらの方法も繊維束の間をセラミックスで埋める。

問題は製造工程においてすでに始まっている。炭素繊維と炭化ケイ素の母材は、熱を受けたときの伸びる度合いが異なる。これを熱膨張係数の差という。高温状態から室温へと冷却されると、互いに異なる度合いで収縮する。その結果、母材の内部に微細な亀裂網が生じる。この微細亀裂は製造過程で不可避免的に発生する。

亀裂は酸素が内部へ侵入する通路となる。外見上は問題なく見えても、内部へ酸素が入り込む。壁紙に生じた小さな隙間から水が染み込むのに似ている。内部へ侵入した酸素は、炭素繊維と界面層を侵食する。界面層とは繊維と母材との間の薄い境界である。

炭化ケイ素の母材は酸素と反応すると二つの様式で反応する。温度がそれほど高くなく酸素が十分にあるときは、表面にガラス質の膜が形成される。この膜は二酸化ケイ素からなる薄い保護層である。これを受動酸化という。このガラス膜が酸素の侵入を防ぎ、材料内部を保護する。

反対に、温度が極めて高いか酸素分圧が低い場合は状況が一変する。保護ガラス膜が形成されない。代わりに炭化ケイ素が気体となって直接揮発する。これを能動酸化という。能動酸化では表面が保護膜なしに削られ続ける。高高度の極超音速飛行においてこのリスクが高まる。

界面層が消失すると、複合材の強みが失われる。本来、繊維は亀裂が進展する際に橋渡しのように亀裂を架橋して保持する。これを繊維架橋という。界面が酸化によって消失すると、この保持する力が失われる。そうすると材料は突然脆性破壊を起こしやすい状態になる。層間が剥がれる層間剥離損傷も同時に発生する。

この損傷は外見には現れにくい。表面は正常に見えても、内部で界面が先に劣化する。そのため、目視検査だけでは不十分である。材料内部への酸素の侵入と界面の状態を評価しなければならない。人工知能による寿命モデルが、外見ではなく内部に潜むこの損傷を読み取る。

2026年に発表されたある研究が、この損傷を数値で示している。ウ研究チームは、2.5次元構造のC/SiCの酸化損傷を物理モデルによって予測した。この研究において、室温での引張強度は約264メガパスカルであった。1100度まで上昇すると、強度は約184メガパスカルへと低下した。弾性率も同区間で約23パーセント減少した。この研究は人工知能モデルではなく、物理ベースの構成モデルを用いている。

酸素を遮断する別の方法もある。表面に保護コーティングを施す方法である。これを環境遮蔽コーティングという。このコーティングは酸素や水蒸気が内部へ侵入するのを防ぐ。極超音速研究では、摂氏2000度を超えて耐えるコーティングを目標としている。コーティングの厚さと組成を決定するのに人工知能が用いられる。

この結果はあることを示唆している。材料の平均的な性質だけを見ていては界面の損傷を見逃す。酸素がどこに、どれだけ侵入したかという位置を考慮しなければならない。温度履歴と荷重履歴も併せて確認する必要がある。後述する人工知能寿命モデルがまさにこの役割を担う。

ここで限界についても触れておく。ウ研究チームのモデルは物理ベースの計算である。人工知能がなくとも損傷を予測できる。人工知能はこのような物理モデルのデータを学習し、計算速度を高める方向で活用される。物理モデルと人工知能は競合相手ではなく、互いの不足を補い合うパートナーである。

5.1.3 超高温セラミックスが溶融・剥離する過程（UHTC）

超高温セラミックスは融点が極めて高いセラミックスである。代表的な材料は二ホウ化ジルコニウムと二ホウ化ハフニウムである。二ホウ化ジルコニウムはジルコニウムとホウ素の化合物である。これらの材料の融点は摂氏3000度を超える。そのため、極超音速の前縁やロケット部品の候補として研究されている。

融点が高いからといって安心はできない。真の問題は酸化である。二ホウ化ジルコニウムが酸素と反応すると、二つの酸化物が生成される。一つはジルコニアと呼ばれる硬質な酸化物である。もう一つは三酸化二ホウ素と呼ばれるホウ素酸化物である。

三酸化二ホウ素は低温で興味深い性質を示す。摂氏約450度で溶融して液体となる。この液体が表面の微小な隙間を埋める。傷口に塗る軟膏が隙間を塞ぐように機能する。これを自己修復被膜と呼ぶ。初期の酸化段階において、この皮膜が材料を保護する。

しかし、温度がさらに上昇するとこの防御は崩れる。摂氏約1100度を超えると、三酸化二ホウ素が徐々に蒸発する。摂氏1500度前後に達すると、この膜は事実上消失する。正確な限界温度は酸素分圧、ガス速度、圧力によって異なる。そのため、単一の固定値として述べることは難しい。

炭化ケイ素を添加すると状況は改善する。炭化ケイ素が酸化されて生じた液状ガラスが三酸化二ホウ素と混ざり合う。二つの成分が合わさることでボロシリケートというガラス相を形成する。このガラスがより高い温度まで表面を覆う。

温度がさらに高くなると、このガラスさえも耐えられなくなる。摂氏約1700度を超えるとガラスの粘度が低下する。ガラスが蒸発し、高速のガス流によって吹き飛ばされる。このようにして保護膜が失われると、表面が急速に削り取られていく。最終的に表面には多孔質のジルコニア骨格のみが残る。この多孔質の骨格は、酸素を内部へと一層透過させやすくなる。

ジルコニアにはもう一つの落とし穴がある。ジルコニアは温度に応じて結晶構造が変化する。冷却過程において正方晶系から単斜晶系へと転移する。この二つの名称は原子の配列様式の違いを示している。この相変態が起こると、体積が約4.5パーセント膨張する。

体積が急激に膨張すると、酸化膜の内部に大きな応力が発生する。冬に水が凍って瓶を割る現象に似ている。この応力が酸化膜に亀裂を生じさせる。亀裂が連なると酸化膜が破片となって剥がれ落ちる。これを剥離という。剥がれ落ちた箇所には新たな表面が露出し、再び酸化が始まる。

ハイエントロピーホウ化物は、この問題に対する新たなアプローチである。ハイエントロピーセラミックスは、複数の金属元素をほぼ同量ずつ混ぜ合わせたセラミックスである。5種類の金属を1つの結晶に入れることもある。組成の幅が広く、人工知能による探索に適している。どの組み合わせが酸化に強いかを、コンピューターで事前に絞り込むことができる。

2026年に超高温セラミックスをまとめた総説は、この流れをよく示している。この総説は、実験、マルチスケールシミュレーション、データ駆動型設計を併せて扱っている。マルチスケールとは、原子スケールから部品スケールまで複数の階層をつなぐ手法である。データ駆動型設計は、人工知能が組成と微細構造を選び出す手法である。

人工知能は酸化膜の厚さ予測にも用いられる。ある研究チームは、超高温ホウ化物の酸化損傷を機械学習で予測した。彼らはランダムフォレストという手法で酸化膜の厚さを予測した。ランダムフォレストは、複数の決定ルールを集めて結論を導く手法である。ただし、酸化膜の実際の挙動は風洞やアークジェット試験で確認しなければならない。アークジェットは超高温ガスを噴射して飛行環境を再現する装置である。

融点予測にも機械学習原子間ポテンシャル（MLIP）が用いられる。これは、人工知能が原子間の力を高速で計算する手法である。2025年に、ある研究チームはMLIPを用いてハイエントロピーセラミックスの融点を予測した。融点が高い組み合わせをコンピューターで事前にスクリーニングした。この手法は実験を行う前に候補を絞り込む。そうすれば、コストのかかる合成や試験の回数が削減される。このように計算が事前に候補を絞り込むことで、材料探索全体が加速する。

それでも残る疑問がある。コンピューターが選んだ組み合わせが、実際に酸化に強いのかどうかである。計算は理想的な条件を仮定している。実際の表面には不純物や欠陥が存在する。ガスの流れや圧力も計算とは異なる。そのため、最終的な判断は実物試験によって下される。人工知能は、試験すべき候補を賢く選び出す役割にとどまる。

5.2 結晶粒をグラフに変換して寿命を予測する方法

本節で扱う内容

本節では、材料の内部を人工知能が読み取れる形式に変換する方法を扱う。そのツールが時空間グラフニューラルネットワークである。グラフとは、点と線で関係性を描いた図である。地下鉄の路線図が良い例である。駅が点であり、区間が線である。

材料内部の結晶粒を点に、結晶粒の境界を線に変換する。ここに時間の流れを加える。熱と応力を繰り返し受けることで損傷が蓄積するためである。本節では、そのグラフをどのように構築し、損傷がどのように進展し、物理法則をどのように学習に組み込むかを説明する。時間と空間を同時に捉えるという意味で、時空間モデ

ルと呼ばれる。

5.2.1 微細構造をグラフに変換する

結晶粒とは、材料内部の微小な結晶の粒である。金属やセラミックスは単一の巨大な結晶ではない。無数の小さな粒が集まって構成されている。それぞれの粒は、原子の向いている方向が少しずつ異なる。この方向を結晶方位と呼ぶ。

結晶方位を測定する代表的な装置が電子後方散乱回折（EBSD）である。電子顕微鏡内で電子を照射し、各結晶粒の方位を読み取る。この装置は表面をスキャンしながら、結晶粒ごとに方位を記録する。その結果は色鮮やかな方位マップとして出力される。

結晶粒界とは、2つの結晶粒が接する境界である。この境界は、材料の脆弱な部分になりやすい。酸素はこの経路に沿って浸透する。亀裂もこの境界に沿って進展する。したがって、境界の性質を把握することが寿命予測の核心となる。

グラフに変換する方法は、シンプルな発想に基づいている。結晶粒の1つを点、すなわちノードとする。2つの結晶粒が隣接していれば、その間を線、すなわちエッジで結ぶ。こうすることで、複雑な顕微鏡写真が明快な関係図になる。人工知能は写真よりもこの関係図をより正確に読み取ることができる。

ノードには結晶粒の情報を格納する。結晶粒のサイズ、形状、方位を入力する。その位置における温度や応力も入力する。応力とは、物体を押したり引っ張ったりする力の大きさである。こうすることで、1つの点がその結晶粒の状態を集約する。

エッジには境界の情報を格納する。2つの結晶粒の方位差を入力する。境界の面積と向きも入力する。酸化によってどの程度損傷したかも入力する。方位差が大きい境界ほど、酸素がより侵入しやすい傾向がある。

このような手法は、すでに他の材料で検証されている。2023年に、ある研究チームはこのグラフ手法を鋼に適用した。彼らは鋼の結晶粒ごとに、疲労損傷が激しい箇所を分類した。疲労とは、力を繰り返し受けることで生じる損傷である。EBSDマップをグラフに変換して学習させた。この研究において、グラフ手法は結晶粒ごとの損傷部位を特定する上で有用性を示した。ただし、この研究が扱ったのは鋼の疲労分類である。セラミックスの寿命やクリーブ破断、経時変化を予測した研究ではない。

セラミックスの寿命予測にこのグラフ手法を応用することは、本書が提案する方向性である。セラミックスを対象とした実証はまだ行われていない。以下の説明は検証済みの事実ではなく、研究が進むべき道を描いたものである。

境界情報を扱う新たな手法も登場している。2026年に、ある研究チームはEBSDマップの欠損部をグラフ学習によって補完した。測定から漏れた領域を、結晶学の規則に従って補う技術である。この手法は、結晶規則を人工知能に組み込むことで、不適切な方位で埋めてしまわないようにする。材料データは常に完全であるとは限らないため、このような補完技術が有用となる。

グラフ手法には、画像よりも優れた点がある。画像はピクセル一つひとつを処理する。そのため、結晶粒がどこで始まりどこで終わるのかを自ら認識することはできない。グラフは結晶粒をひとつの単位としてまとめる。人間が材料を観察する方法に近い。そのため、結晶粒同士の関係性を学習しやすい。

グラフはサイズが異なっても扱いやすい。画像はサイズが固定されている必要がある。グラフは結晶粒の数が増減しても同じ方法で処理できる。材料ごとに結晶粒の数が異なるため、この性質が役立つ。小さな試験片で学習した規則を、大型部品に適用してみることができる。ただし、サイズが大きくなると欠陥の分布や温度勾配も変化する。したがって、大型部品で再検証する段階が必要である。

このように構築したグラフは、セラミックスにも応用できる。セラミックスもまた、結晶粒と粒界によって構成されているためである。超高温セラミックスの酸化やクリーブも、境界から始まる。クリーブとは、長時間にわたって応力を受けることで材料が徐々に伸びる現象である。そのため、このグラフ手法がセラミックスの寿命予測の基盤となる。

5.2.2 近傍と時間を同時に捉えるグラフ学習

ここで、グラフに時間の流れを加える。損傷は一瞬で完結するものではない。熱と応力が繰り返されることで、少しずつ蓄積していく。したがって、同じ材料であっても時間の経過とともにグラフが変化する。この変化を追跡することが、時空間モデルの役割である。

まず空間的な側面を見る。1つの結晶粒の状態は、隣接する結晶粒の影響を受ける。隣の結晶粒が大きな力を受けると、自身の結晶粒にも力が伝達される。この隣接情報を集約する計算が、グラフ畳み込みである。各ノードが隣接ノードの情報を受け取り、自身の状態を更新する。

すべての隣接要素を一律に扱うわけではない。ある境界は損傷に大きく寄与し、ある境界はそれほど寄与しない。そのため、モデルは隣接要素ごとに異なる重みを付与する。この重みを決定する手法がアテンションである。重要な隣接要素により大きな注意を向ける仕組みである。

アテンションに物理知識を組み込む点が極めて重要である。境界の方位差が大きいと、粒界エネルギーが高くなる。粒界エネルギーが高いと、酸素がより侵入しやすくなる。このような物理規則を重み計算に反映させる。そうすることで、データが少なくてもモデルが的外れな結論を出すのを防ぐことができる。

時間的な側面も同様に処理する。過去の状態が次の状態を生み出す。昨日までに蓄積された損傷の上に、今日の損傷が加算される。モデルはこの時間の連鎖を学習する。このために、時系列を扱うニューラルネットワーク構造を使用する。

本節で扱う重要な損傷は方向性を持つ。セラミックス基複合材料では、まず母材に微細な亀裂が生じる。この亀裂に沿って、繊維と母材の界面剥離が起こる。その隙間から酸素が侵入し、酸化層が成長する。損傷は通常、応力やガスが向かう方向に沿って拡大する。

この方向性を持つ損傷は、材料の寿命に大きな影響を与える。亀裂と界面剥離が一方向に連なると、その方向の強度が低下する。気孔同士がつながると、酸素の流路が広がる。粒界に存在するガラス相が移動することで、損傷を伝播させることもある。このような変化がクリープ速度を変化させ、破断を早める。破断とは、材料が負荷に耐えきれずに破壊される瞬間を意味する。

結晶粒界すべりも、本節で扱う重要な損傷である。高温下では、結晶粒が境界に沿って互いにすべり合う。濡れたレンガが互いに滑り落ちる様子に似ている。このすべりがクリープ変形を増大させる。境界の向きと性質が、すべりの大きさを決定する。したがって、境界情報を格納したエッジが重要となる。

高温のガスは通常、一方向に流れて表面を押圧する。そのため、セラミックスの損傷も方向性を持って進展する。時空間グラフモデルは、この方向性までも学習に組み込もうとする。これにより、損傷がどの方向へ進展するかを予測することができる。このような方向性の予測は、まだ検証するためのデータが不足している。

時間を扱う方法には2つのアプローチがある。1つは、時系列を順番に読み取っていく方法である。文章を先頭から順に読んでいくことに似ている。もう1つは、変化の速度を直接扱う方法である。損傷がどれほど急速に拡大するかを学習する。いずれの方法も、損傷が蓄積していくプロセスを捉えている。

アテンション手法は、現代の人工知能における中核的なツールである。テキストを翻訳する人工知能もこの手法を用いている。文章の中で重要な単語により集中するという原理である。材料グラフにおいては、損傷に大きく関わる隣接要素に集中する。同じアテンションの原理が、言語翻訳と材料分析の双方で活用されている。

このような時空間グラフ手法は、現在も発展途上にある技術である。セラミックス基複合材料を対象とした大規模な実証研究はまだ少ない。高精度な予測を行うには、質の高いデータが大量に必要となる。超高温試験のデータを収集すること自体が容易ではない。したがって、次の小見出しで扱う物理法則の助けが必要となる。

5.2.3 方向性を考慮したクリープ破断と物理規則を組み込む学習

クリープとは、長時間にわたって応力を受けることで材料が徐々に伸びる現象である。長く吊るされた物干しロープが少しずつたるんでいくようなものである。高温下ではこの現象が加速する。ロケット部品は高温の状態で長時間力を受け続ける。そのため、クリープはロケット部品の寿命を左右する重大な変数となる。

クリープ損傷は、方向によって異なる蓄積の仕方をする。これを異方性と呼ぶ。異方性とは、方向によって性質が異なる特性のことである。木材が木目の方向に沿って割れやすいのと同じである。材料は複数の方向から同時に力を受ける。これを多軸荷重と呼ぶ。

研究者らは、この損傷を1つの変数として要約する。これを損傷変数と呼ぶ。損傷変数が0であれば材料は健全である。1であればその部位が破断したことを意味する。損傷が拡大するにつれて、残った部分がより大きな力を受けるようになる。すると損傷の進行はさらに加速する。このフィードバックによって損傷は歯止めが利かないほど急速に拡大し、破断を早める。

温度が上昇するとクリープが加速する。原子がより活発に運動するためである。この温度依存性を指数関数で表現する。温度がわずかに上昇しただけでも、損傷速度は急激に跳ね上がる。したがって、表面の最高温度を下げるのが極めて重要になる。前節のコーティングと本節の熱流が、ここで結びつく。

酸化はこの損傷をさらに加速させる。酸化膜が厚くなるほど、粒界が脆弱になる。そのため、損傷則に酸化膜の厚さを併せて組み込む。クリープと酸化を別個に捉えるのではなく、同時に扱うという意味である。ロケット環境では、この2つが常に同時に発生するためである。

ここで重要な物理規則が1つある。損傷は一方向にのみ拡大する。一度発生した亀裂が自然に塞がることはない。時間が経過しても損傷変数が減少することはない。この規則を損傷の不可逆性と呼ぶ。熱力学第二法則と同じ文脈である。

人工知能がこの規則に違反すると、予測は誤ったものになる。損傷が減少するという解を出力すれば、現実と矛盾する。そこで、学習時にペナルティを与える。規則に反する解が出た場合、損失を大きく設定する。このペナルティを損失関数に組み込む手法が、物理情報学習である。

物理情報学習には、他の規則も併せて組み込む。力の釣り合いがその代表例である。ある一点において、押す力と引く力の総和は釣り合わなければならない。質量が勝手に消失したり生成したりしないという規則も入れる。このような規則を損失関数に加える。そうすれば、モデルが物理的に矛盾した解を導き出すのを防ぐことができる。

破断基準においても方向性を併せて考慮する。材料は引張力に対して脆弱である。そのため、引張力が最大となる方向を個別に観察する。内部から膨張させる圧力も同時に考慮する。多方向からの力をひとつの危険度として統合する。この危険度が、損傷が進展する速度を決定する。

この方式のルーツは物理情報ニューラルネットワーク（PINN）である。2019年にライシ研究チームがこの概念を整理した。彼らは物理方程式をニューラルネットワークの学習に直接組み込んだ。データが少なくても物理規則が隙間を埋めるという発想である。この発想がセラミックスの寿命予測にそのままつながつている。

物理規則の真価は予測の拡張において現れる。試験データは通常、低い温度に集中している。本当に知りたいのは摂氏2000度前後の挙動である。このような高温のデータはほとんどない。物理規則があれば、データの無い領域も妥当に見通すことができる。

ただし、この方式にも限界がある。物理規則を誤って組み込むと、かえって予測が悪化する。規則間の重み付けを決めることも難しい。実際の破断データで検証する段階を省くことはできない。そのため、人工知能による予測は試験の代替ではなく、試験を削減するツールとして用いる。

5.3 繊維の織り構造とコーティングを設計する生成モデル

前節ではすでに作られた材料の寿命を予測した。本節では方向を変える。所望の性能をまず設定し、その性能を発揮する構造を逆に探索する。これを逆設計と呼ぶ。料理に例えれば、出したい味を決めてからその材料の配合を探すようなものである。

本節の対象は、3次元に編まれた繊維構造と界面コーティングである。繊維をどの角度で編むか、コーティングをどれだけの厚みで施すかを定める問題である。このために拡散モデルと呼ばれる生成人工知能を用いる。拡散モデルは不鮮明なノイズから鮮明な構造を作り出す手法である。ここに、向きが変わっても結果がブレない

性質を加える。

5.3.1 立体に編まれた繊維構造と向きに左右されない学習

3次元編組複合材料は、繊維束を立体的に編んだ材料である。籠を3方向に細かく編み込んだ姿に似ている。通常の複合材料は薄い層を積み重ねて作る。その場合、層と層の間が弱く剥がれやすい。これを層間剥離と呼ぶ。

3次元編組はこの弱点を克服する。繊維が多方向に絡み合っており、層の境界が存在しない。そのため、層が剥がれる損傷が起こりにくい。これは極超音速の前縁のように熱衝撃が大きい部位に有利である。熱衝撃とは、急激に加熱されたり冷却されたりする際に生じる損傷である。

編組方式にはさまざまなタイプがある。繊維を4方向に編むこともあれば、さらに多くの方向に編むこともある。方向が多いほど、多様な荷重に均等に耐えられる。その代わり、編む工程が難しくなる。したがって、部品の用途に適した編み方を選ばなければならない。この編み方の選択も逆設計が扱う対象となる。

問題は、編み構造が常に完璧とは限らない点である。実際の製造では繊維にねじれが生じる。押し潰されて断面が歪むこともある。編み角度もわずかにブレる。コーティングの厚さも場所によって不均一になる。このようなばらつきは、特定の位置に応力を集中させる。

このばらつきは確率として扱う。すべての製品が同一ではなく、少しずつ異なるためである。そのため、単一の正解構造ではなく構造の分布を扱う。拡散モデルはこの分布を扱うのに適している。拡散モデルは、妥当性の高い多様な構造を作り出すことができる。

ここで等変性という性質が重要になる。等変性とは、物体を回転させると結果も同様に回転する性質である。部品を左に回転させれば、予測される力も一緒に左へ回転しなければならない。この性質がなければ、同じ構造であっても置かれた向きによって異なって判断され、物理法則に反することになる。

3次元空間において物体は回転することも平行移動することもある。この2つの動きを合わせて扱う数学が存在する。これを特殊ユークリッド群と呼ぶ。名称は難解だが意味は単純である。回転と並進移動をまとめて扱う規則の集まりである。人工知能がこの回転と移動の規則を常に満たすように設計する。

このような等変拡散モデルは、分子設計の分野で先行して発展した。2025年にチェン研究チームは、マルチスケールのグラフを統合した等変拡散モデルを発表した。彼らはこのモデルを用いて3次元分子を設計した。分子もまた3次元空間で回転し移動する対象である。そのため、同じ数学的枠組みを繊維構造にも移植することができる。ただし、この研究が扱ったのは分子であってセラミックス繊維の編組ではない。繊維束、編組の制約、気孔、製造可能性は、まだこのモデルで検証されていない。セラミックス編組への適用は、本書が提示する方向性である。

等変性がなぜ重要なのか、例を挙げて見てみよう。同じネジを机の上に様々な向きで置いてみる。ネジの強度は置かれた向きとは無関係である。人工知能もこの事実を尊重しなければならない。等変性がなければ、同じネジでも向きごとに異なって判断してしまう。そうなると向きごとにデータを別々に集めなければならない、学習において大きな無駄が生じる。

等変性を保てばデータを節約できる。一つの方向のデータだけであらゆる方向を扱うことができる。材料データが貴重な状況において、この節約効果は大きい。したがって超高温セラミックスのようにデータが少ない分野に適している。物理法則を構造に刻み込む手法と見なすことができる。

要約すると、3つの要素が組み合わさる。3次元立体構造、確率的なばらつき、そして向きに左右されない性質である。これら3つを単一のモデルに盛り込む。そうしてこそ、実際の製造における多様性をありのままに反映できる。次の小見出しでは、このモデルがどのように構造を作り出すのかを見ていく。

5.3.2 ノイズから構造を復元する拡散モデル

拡散モデルの基本的な発想は2つの段階に分かれる。前段階は構造をノイズによってぼやけさせる過程である。後段階はノイズから構造を復元する過程である。人工知能は復元する過程を学習する。インクの1滴が水中に拡散していく様子を逆再生するようなものである。

まず前段階から見ていく。鮮明な繊維構造にノイズを少しずつ加えていく。時間が経つにつれて構造がぼやけていく。最終的には完全なノイズだけが残る。この過程は規則に従って徐々に進行する。その規則をノイズスケジュールと呼ぶ。

後段階はこの過程を逆にたどる。ノイズから始まって少しずつ構造を復元していく。各ステップでノイズを少しずつ取り除いていく。このとき、どの方向に取り除くべきかを指示する値が存在する。これをスコアと呼ぶ。スコアは構造がより妥当になる方向を指し示す。

人工知能はまさにこのスコアを学習する。ぼやけた構造を見て鮮明な方向を推測する。学習が完了すれば、純粋なノイズからでも構造を作り出すことができる。この方式をスコアベース拡散と呼ぶ。昨今の画像生成人工知能も同じ原理で絵を描いている。

この方式が材料設計に適しているのには理由がある。材料の構造には単一の正解だけが存在するわけではない。同一の性能を発揮する複数の構造が存在する。拡散モデルはこれら複数の候補を生成する。そうすれば人間はそこから製造しやすいものを選択できる。単一の解ではなく複数の選択肢を提示してくれる点に有用性がある。

ここに条件を付与することが逆設計の核心である。単に無作為な構造を作っても役に立たない。所望の性能を備えた構造を生成しなければならない。そこで目標性能を条件として入力する。目標には熱伝導率、引張強度、破壊靱性、アブレーション速度などを設定する。

破壊靱性とは亀裂が進展する際に耐える力である。アブレーション速度とは表面が削り取られていく速さである。これらの値を所望のレベルに設定する。するとモデルはその条件に合致する構造を選び出して生成する。目標を強く反映させるか弱く反映させるかも調整できる。

この条件反映技術はすでに多様な材料で用いられている。2025年にある研究チームは、物理的制約を組み込んだ3次元拡散モデルを発表した。彼らは繊維強化ポリマー複合材料を目標性能に合わせて設計した。所望の応力-ひずみ曲線を設定し、その構造を逆方向に探索した。この手法は、生成過程において物理規則を直接遵守させた。

条件を強く設定すると別の問題が生じる。目標性能ばかりを追求すると、製造不可能な構造が出現する。机上では優れていても、実際には編むことができない織り構造である。そのため、製造可能な範囲内で解を探索させる。製造規則を条件として併せて組み込む手法である。性能と製造可能性の間でこのバランスを取ることが、逆設計における困難な点である。

セラミックス複合材料にこの方式を適用するには乗り越えるべきハードルがある。セラミックスの3次元構造データを大量に収集しなければならない。このデータはX線断層撮影によって取得される。X線断層撮影は病院のCTスキャンと同じ原理である。部品を切断することなく内部を立体的に観察できる。このようにして得られた構造がモデルの基盤となる。

データを収集する作業には時間がかかる。1つの試験片を撮影するだけでも長時間を要する。撮影したデータを粒子と繊維に分離・識別する作業にも手間がかかる。そのため、データは常に不足している。前述の等変性がこの不足を補ってくれる。少量のデータでより多くのケースを学習させることができるためである。

5.3.3 繊維角度とコーティング厚を同時に決定する

逆設計モデルが下す2つの決定がある。1つは繊維を編む角度である。もう1つは界面コーティングの厚さである。この2つが材料の強度と耐熱性を大きく左右する。

まず繊維の角度から見ていく。力は通常、特定の方向に大きく作用する。ロケットノズルは内側から押し広げる力を受ける。極超音速の前縁は流れの方向にせん断力を受ける。繊維が力の方向に合わせて配置されれば、

材料は力によく耐えることができる。そのため、モデルは力を考慮して角度を決定する。

コーティングの厚さもそれに劣らず重要である。ここで2種類の被膜を区別する必要がある。1つは繊維と母材の間に挟む薄い界面層である。この界面層は窒化ホウ素や熱分解炭素で作られる。この被膜は亀裂が繊維を直接破断するのを防ぐ。亀裂が被膜に沿って滑ることで応力を分散させる。界面層が薄すぎるとこの効果が弱まり、厚すぎると別の問題が生じる。

もう1つは材料の外側に施す環境遮蔽コーティングである。このコーティングは酸素や水蒸気が内部に侵入するのを防ぐ。希土類ジシリケートがこの外側コーティングの候補である。この材料は高温下で酸素を効果的に遮断する。界面層と外側コーティングは位置も役割も互いに異なる。2つの被膜を何層にも重ね、各層に異なる役割を担わせることもある。

逆設計モデルはこの2つの決定を同時に扱う。強度を高めつつ熱応力は下げようとする。2つの目標はしばしば互いに衝突する。一方を得れば他方をいくらか失う。このような問題を多目的最適化と呼ぶ。モデルは強度と熱応力の間で優れたバランス点を見出す。

応力が1箇所に集中する現象を応力集中と呼ぶ。衣服が1本の縫い目からほつれ始めるのと同じである。応力集中が大きい箇所から亀裂が真っ先に発生する。そのため設計では応力を均等に分散させようとする。繊維の角度とコーティングの厚さを調整する理由がここにある。

バランスを模索する際には滑らかさも同時に考慮する。繊維が急激に折れ曲がると、その位置に応力が集中する。コーティングの厚さが急激に変化しても同様である。そのためモデルは、角度や厚さが滑らかにつながるように誘導する。角度や厚さが急変する設計にはペナルティを科す方式である。

このような逆設計はまだ概念実証の段階に近い。特定の性能値をどれほど改善できるかという主張は慎重に受け止める必要がある。モデルが提示した構造が実際にその性能を発揮するかどうかを確認しなければならない。確認は再び製造と試験によって行われる。人工知能は候補を絞り込む役割を担う。

2026年にはテキストで条件を指定する生成研究も登場した。ある研究チームは、目標とする特性を記述した文章から微細構造を生成した。これはまだ査読を経ていない初期段階の研究である。それでも方向性は明確である。人間が所望の性能を言語で伝えれば人工知能が構造を作り出すという潮流である。この潮流がセラミックス複合材料の設計へとつながっていく可能性がある。

5.4 極微の世界と部品全体の熱流をつなぐ

本節では材料内部の熱流を扱う。熱は材料の寿命を左右する鍵である。熱がどこへどれほど速く流れるかを把握して初めて温度を予測できる。温度が分かるとこそ、その後の酸化速度やクリープ速度を予測することができる。

問題は、熱流が極微の世界で決定されるという点である。原子の振動が熱を運ぶ。しかし私たちが知りたいのは部品全体の温度である。極微の世界と巨視的な世界をつなげなければならない。この連結をマルチスケール整合と呼ぶ。本節では、その連結をディープ演算子ニューラルネットワークで実現する手法を解説する。

5.4.1 原子の振動から熱伝導を計算する（グリーン・久保分子動力学）

セラミックスにおいて熱は原子の振動によって伝達される。この振動の粒子をフォノンと呼ぶ。フォノンは音の粒子と考えると分かりやすい。格子に沿って振動が伝播し、熱を運ぶ。この振動がどれほどスムーズに伝わるかが熱伝導率を決定する。

高温下ではこの振動同士が衝突する。フォノン同士が衝突すると熱の流れが乱される。結晶粒界や欠陥、混入した異種原子も振動を散乱させる。このような散乱が多いほど熱の伝わりは遅くなる。超高温セラミックスの熱伝導を理解するには、この散乱を把握しなければならない。

ハイエントロピーセラミックスはこの点で特異である。複数の元素が混ざり合っただけで格子が不均一になっている。この不規則性が振動を強く散乱させる。その結果、熱が伝わりにくくなる。遮熱が目的であれば、この性質

が役立つ。表面の熱が内部へと侵入しにくくなるためである。

この小さな世界を計算する方法が分子動力学である。コンピュータの中で原子を一つ一つ動かしてみる。原子がどのように振動し衝突するかを追跡する。この計算はナノ秒単位の短い時間を扱う。ナノ秒は10億分の1秒である。それほど小さく速い世界である。

熱伝導率を導き出す公式がグリーン・久保公式である。この公式は熱流の揺らぎを長く見守る方式である。穏やかな水のさざ波を見守りながら水の性質を突き止めることと似ている。原子が自ら作り出す熱流の揺らぎを集める。その揺らぎから熱伝導率を計算する。この公式は1950年代にグリーンと久保が打ち立てた。

計算の精度は、原子間の力をどれほど正確に把握しているかにかかっている。この力を扱う規則を原子間ポテンシャルと呼ぶ。かつては人間が手作業で作った単純な規則を用いていた。この規則は高速だが精度が低かった。逆に量子計算は正確だが遅すぎた。

ここで機械学習原子間ポテンシャル（MLIP）が橋渡しをする。人工知能が量子計算の結果を学習して力を予測する。量子計算に近い精度を高速で生み出す。この手法は本書の前章で詳しく扱う。超高温の熱伝導計算でもMLIPが用いられる。

近年の研究はこの組み合わせの力を示している。2021年のある研究チームはMLIPでジルコニアを扱った。彼らは温度に伴う相変態と熱伝導を共に計算した。グリーン・久保方式で熱の流れを導き出した。この方式は原子の振動による複雑な影響を余すところなく捉える。

この計算には留意すべき限界がある。グリーン・久保方式は材料が平衡状態にあるときの熱伝導率を求める。この値は材料内部の基本的な性質を示している。しかしアブレーションが起こる表面は平衡状態ではない。そこでは放射と表面化学反応が熱を大きく左右する。そのため、グリーン・久保の値だけで表面の熱をすべて説明することはできない。この値は部品内部の熱伝導の入力として用いるのが適している。

なぜあえてこれほど小さな世界にまで踏み込まなければならないのか。熱伝導率を直接測定すればよいのではないか。超高温では測定が困難である。摂氏2000度のセラミックス内部を測定することは容易ではない。酸化が進行し、材料自体が変化してしまう。そのため、計算によって値を得る道が必要となる。

計算にはもう一つの利点がある。まだ作製していない組成も事前に確認できる点である。ハイエントロピーセラミックスは組み合わせが無数に存在する。これらすべてを作製して測定することは不可能である。計算は候補の熱伝導を事前に知らせてくれる。そうすれば有望な組み合わせだけを選別して実際に作製できる。

この流れは現在も続いている。2026年のある研究では、グリーン・久保とMLIPを用いて極めて低い熱伝導率を予測した。多様な材料においてこの組み合わせが定着しつつある。ただし、計算には依然として大規模なコンピュータを要する。時間打ち切りや統計的揺らぎといった誤差も扱わなければならない。そのため、複数回計算して平均をとる。

ここでも検証の原則は同じである。計算値は実験値と照合しなければならない。いくつかの既知の材料で計算を検証する。計算が実験とよく一致すれば、新材料に対しても信頼が持てる。この照合プロセスを経ていない値は参考にとどまる。計算と実験は互いを確認し合う二つの眼である。

5.4.2 部品全体の熱流方程式

前の小見出しではごく小さな世界を扱った。今度は部品全体へと視野を広げる。部品の温度は場所によって異なり、時間とともに変化する。この変化を扱う規則が熱伝導方程式である。方程式は数式で表すが、意味は言葉で説明できる。

熱伝導方程式の意味は単純である。ある場所の温度変化は、流入した熱と流出した熱の差によって決まる。熱は高温側から低温側へと流れる。この流れの速さが熱伝導率である。先ほど計算したその値がここに代入される。

この方程式が難しい理由はいくつかある。まず、熱伝導率が温度によって変化する。温度が上昇すると熱伝導率が変わる。これを非線形と呼ぶ。非線形とは原因と結果が単純な比例関係にないことを指す。これに加え、

材料は方向によって性質が異なる。繊維が配向した方向により熱が流れやすい。

ここに材料自体が変化するという問題が加わる。酸化が進行すると熱伝導率が変わる。表面が削られると厚みが減少する。そのため、方程式のパラメータが時間とともに変化する。前節の酸化やクリープが本節の熱流と絡み合う。したがって、これら多様な現象を個別に切り離すのではなく、同時に連成して解かなければならない。

境界で起こる現象も複雑である。極超音速環境の表面には多様な熱が重なる。空気が加熱する熱が流入する。表面が光として熱を放出する放射もある。高温の物体が赤く輝きながら熱を失う現象である。ここに化学発熱まで加わる。

化学発熱は、表面で原子が再結合する際に生じる。極超音速では空気分子が原子に解離する。これらの原子が表面で再びペアを作ると熱を発生する。これを触媒再結合と呼ぶ。表面材料によってこの熱の大きさが異なる。そのため、どのような材料を選択するかが表面温度を大きく左右する。

これらすべての熱を一つの方程式の境界条件に組み込む。流入する熱、放出される放射、化学発熱を併せて考慮する。時間も共に経過する。飛行軌道に沿って熱が絶えず変化する。これを非定常状態と呼ぶ。静止した一瞬ではなく、進行するプロセスを扱うという意味である。

この方程式を解く従来の方法が有限要素法である。部品を小さな要素に細かく分割する。要素ごとに方程式を解き、それをつなぎ合わせる。この手法は正確だが計算に長い時間を要する。時間刻みごとに反復計算が必要となる。マッハ7の軌道全体をリアルタイムで解くことは難しい。

ロケットや極超音速の開発には迅速な解が必要である。設計を変更するたびに温度を再計算しなければならない。試験中にはリアルタイムに近い予測が求められる。計算が遅いとこのような要求に応えられない。そこで次の小見出しの人工知能演算子が登場する。

5.4.3 関数を関数に変換するニューラルネットワーク (DeepONet)

ディープ演算子ニューラルネットワークは、関数を関数に変換する関係を学習する人工知能である。これをDeepONetと呼ぶ。通常のニューラルネットワークは数値を入力すると数値を返す。DeepONetは関数を入力すると関数を出力する。ここで関数とは、時間とともに変化する熱入力のようなものを指す。

この着想は2021年にルー（Lu）らの研究チームが体系化した。彼らは演算子を学習するニューラルネットワークの理論と構造を確立した。この研究は一つの数学的定理に根ざしている。演算子をニューラルネットワークで近似できるという定理である。この近似定理がDeepONetを支える理論的基盤となっている。

DeepONetは二つのネットワークから構成される。一つは入力関数を読み取るネットワークである。もう一つは解を出力する位置と時刻を読み取るネットワークである。二つのネットワークの出力を掛け合わせて解を導き出す。前者のネットワークをブランチ、後者のネットワークをトランクと呼ぶ。ブランチとトランクが合流して温度を出力する。

なぜ関数を関数に変換することが重要なのか。熱問題の入力は単一の数値ではない。時間とともに変化する空力加熱が入力となる。出力も位置や時間によって変化する温度場である。このような問題は関数と関数を結びつける関係にある。DeepONetはこの関係性を丸ごと学習する。

DeepONetの強みは速度である。一度学習すれば、新しい入力に対しても即座に解を出力する。有限要素法のように毎回最初から解き直す必要がない。多様な飛行条件を迅速にスキャンできる。設計を変更しながら温度を評価するのに適している。

問題は学習データである。質の高い解を学習するには、正確なデータが大量に必要となる。しかし、高精度なデータの生成には高いコストがかかる。有限要素計算や分子動力学計算に長い時間を要するためである。データが少なければ人工知能は十分に学習できない。この問題をマルチフィデリティ手法が解決する。

忠実度（フィデリティ）とは計算の精緻さを意味する。高忠実度は正確だがコストの高い計算である。低忠実度は粗いが低コストな計算である。マルチフィデリティはこの二つを併用する。低コストなデータを大量に収

集し、高コストなデータは少量だけ収集する。

この手法の発想は下絵と上塗りに近い。低コストな計算でまず大枠の全体像を描く。高コストな計算でその上に精密な上塗りを行う。人工知能は低忠実度の解と高忠実度の解の差分を学習する。この差分を残差と呼ぶ。残差を学習することで、少量の高コストデータでも精度を向上させることができる。

2022年にルーらの研究チームは、このマルチフィデリティDeepONetをナノ熱伝達に適用した。彼らが扱ったのは極微の世界における熱流の問題である。マルチフィデリティ手法は、同量の高コストデータを用いながら誤差を大幅に低減させた。高コストデータの必要量も大幅に削減した。ただし、この研究はナノ熱伝達を扱ったものである。超高温セラミックスの酸化やアブレーション、マッハ7の熱荷重までを連成させた実証ではない。

均質化という用語についても説明しておく。セラミックス複合材料は繊維と気孔が混在している。この複雑な構造を一つ一つ扱うと計算負荷が過大になる。そこで微小な領域を平均的な性質に置き換える。これを均質化と呼ぶ。低忠実度計算はこの平均性質を用いて大枠を描く。

二つの世界を繋ぐことがなぜ難しいのかについても触れておく。原子の世界はナノ秒単位で動く。部品の世界は数百秒を扱う。時間のスケールが10桁以上も異なる。空間スケールもそれだけ乖離している。このギャップを一度に計算することは不可能である。

セラミックス熱構造においてこの手法で二つの世界を繋ぐことは、本書が提案するアプローチである。低忠実度は簡易な均質化モデルとなる。高忠実度は分子動力学と有限要素法を連携させた精密解析となる。人工知能がこれら二つを橋渡しする構図である。そうすれば、極微の世界の熱伝導が部品の温度へと連動し得る。この連成は、セラミックス熱構造においてはまだ広く検証されていない。

5.4.4 物理法則を組み込む学習と高速化

人工知能が高速だからといって、どのような解でも出してよいわけではない。解は物理法則に従わなければならない。そのため学習に物理法則を組み込む。この手法は前節の寿命予測と同根である。

まずデータに適合させる学習を行う。低忠実度データと高忠実度データの両方に適合させる。人工知能の解がデータに近づくよう誘導する。解とデータとの差にペナルティを与える。このペナルティを損失と呼ぶ。

ここに方程式を遵守させる学習を加える。人工知能の解を熱伝導方程式に代入してみる。解が方程式をよく満たしていればペナルティは小さくなる。外れていればペナルティは大きくなる。このようにすることで、データが存在しない領域でも物理的に妥当な解を出力できる。

物理法則を組み込むと、データが少なくても耐えうる。純粋なデータ駆動型学習は大量のデータを必要とする。データが少ないと、その間を的外れに埋めてしまう。物理法則はその間隙を方程式によって埋める。超高温データが貴重なセラミックスの問題に適している。データが少なくても機能するという点が、物理情報学習の大きな利点である。

境界条件も同様の方法で組み込む。表面の熱バランスを保たせる。流入した熱と放出された放射の収支が合致しなければならない。この規則に反するとペナルティを与える。表面温度は材料寿命に甚大な影響を与えるため、この条件は何よりも重要である。

これら複数のペナルティを一つに統合する。データペナルティ、方程式ペナルティ、境界ペナルティを加算する。各ペナルティに重み付けを行う。人工知能はこの総合ペナルティを極小化するように学習する。そうすることで、高速でありながら物理法則に適合した予測を出力する。

物理法則を組み込むには微分計算が必要となる。温度が位置や時間に伴ってどれほど変化するかを求めなければならない。この微分を自動的に計算する技術が存在する。これを自動微分と呼ぶ。ただし、この計算は負荷が大きく処理速度を低下させる。

そこで演算を軽量化する多様な手法を用いる。計算を分割して重複部分を削減する。滑らかな関数で座標を変換し、微分を容易にする。こうした最適化によって、従来の計算よりもはるかに高速な推論が得られる。ただ

し、具体的な加速倍率や誤差の値は問題ごとに異なる。その値は検証済みの事例からのみ引用すべきである。

この手法の価値は設計段階で発揮される。ノズルの形状を変更すると温度分布が変化する。従来の計算では一度変更するたびに長時間の待機を要する。人工知能演算子は即座に新たな温度分布を提示する。そうすれば1日に数十種類の形状を比較検討できる。設計者はより迅速により優れた解へと到達できる。

試験現場においても有用である。エンジン試験中にはリアルタイムに近い予測が求められる。どの部位が危険な温度に達するかを事前に把握しなければならない。人工知能演算子はこの予測を迅速に出力する。ただし、試験データによって継続的に補正してこそ信頼できる。予測と実測の差を縮める取り組みが続く。

この手法の限界も明確である。物理法則を誤って設定すると解の精度が悪化する。法則間の重みを決定する作業も手間がかかる。超高温の実データが乏しいため検証も難しい。そのため、この技術は依然として研究と試験を並行して進める段階にある。試験を代替するというよりも、試験回数を削減するためのツールとして活用される。

まとめ

本章ではロケットと極超音速飛行体の高温の表面を扱った。この部位の材料は熱、酸化、力、長時間を同時に耐え抜かなければならない。金属では不十分であり、セラミックス材料が必要となる。炭素繊維複合材と超高温セラミックスがその候補である。これらの材料の寿命をあらかじめ把握することが開発の鍵である。

まず、材料がどのように損傷するかを見た。炭素繊維複合材は亀裂に沿って酸素が侵入することで損傷する。炭化ケイ素は温度と酸素圧力に応じて保護膜を得たり失ったりする。超高温セラミックスは酸化膜の蒸発と相変化によって表面が剥離する。この損傷過程が寿命予測の対象である。損傷は通常、材料の内部で静かに始まるため、外側ではなく内側を読み取らなければならない。

次に、人工知能がこの損傷をどのように扱うかを見た。結晶粒を点に、粒界を線に変換してグラフを作成する。ここに時間を加えて損傷が蓄積していく過程を追跡する。物理法則を学習に組み込み、データが少ない超高温領域も見通す。損傷は不可逆であるという規則がその代表例である。

続いて逆設計を見た。所望の性能をあらかじめ設定し、その構造を逆算して探索する。拡散モデルが不鮮明なノイズから構造を形作る。方向性に左右されない性質を組み込んで物理法則に整合させる。繊維の配向角と界面コーティングの厚さを同時に決定する。拡散モデルは単一の解ではなく複数の候補を提示する。それにより人間がその候補の中から製造しやすい構造を選び出す。

最後に、熱流のマルチスケール整合を見た。原子の振動の世界と部品全体の世界を結びつけなければならない。グリーン・久保分子動力学がミクロな世界の熱伝導を計算する。ディープオペレータニューラルネットワークがその値を部品温度へと変換する。マルチフィデリティ手法が低コストなデータと高コストなデータを統合する。この整合のおかげで部品温度を迅速に予測できる。この高速な予測は設計段階と試験現場の双方で有用である。

これらすべてのツールには共通点がある。人工知能が試験の代わりをするわけではないという点である。人工知能は候補を絞り込み、予測を前倒しする。最終確認は風洞、アークジェット、燃焼試験が担う。人工知能と実機試験が連動してこそ、初めて開発が加速する。

もう一つの共通点は物理との融合である。本章の人工知能はデータのみから学習するのではない。熱力学の法則や力の釣り合いを学習に組み込む。そのため、データが少ない超高温領域も扱うことができる。純粋なデータ学習では乗り越えるのが難しい壁である。物理と人工知能の融合が本章の核心的な鍵である。

本章の手法群は互いに連動している。熱流の予測が表面温度を与える。表面温度が酸化とクリープの速度を決定する。酸化とクリープが寿命予測へとつながる。寿命予測が逆設計の目標となる。一つの鎖で結ばれているわけである。

残された課題も多い。超高温の実測データがいまだ不足している。逆設計モデルの性能の主張には実物検証が必要である。物理規則を組み込む手法もさらに洗練させる必要がある。これらの課題が解決されるにつれて、

次世代熱防護システムの設計が前進する。熱防護システムとは、高温の表面から飛行体を保護する構造全体を指す。

韓国もこの分野に足を踏み入れている。ヌリ号や次世代発射体は高温の部品を扱う。再使用ロケットは部品を何度も使用しなければならない。それだけに寿命予測の重要性が高まる。人工知能と物理を併用するこれらの手法がその基盤となる。材料のミクロな世界を読み取る眼が、大いなる飛行の安全を守る。

関連根拠資料

- Binner, J., Porter, M., Baker, B., Zou, J., Venkatachalam, V., Rubio Diaz, V., D'Angio, A., Ramanujam, P., Zhang, T., & Murthy, T. S. R. C. (2020). Selection, processing, properties and applications of ultra-high temperature ceramic matrix composites. *International Materials Reviews*, 65(7), 389-444. <https://doi.org/10.1080/09506608.2019.1652006>
- Fahrenholtz, W. G., & Hilmas, G. E. (2017). Ultra-high temperature ceramics: Materials for extreme environments. *Scripta Materialia*, 129, 94-99. <https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2016.10.018>
- DiCarlo, J. A., Yun, H. M., Morscher, G. N., & Bhatt, R. T. (2004). SiC/SiC composites for 1200°C and above. NASA Technical Reports Server, 20040191405. <https://ntrs.nasa.gov/citations/20040191405>
- NASA. (2008). Ceramic Matrix Composite (CMC) thermal protection systems and hot structures for hypersonic vehicles. NASA Technical Reports Server, 20080017096. <https://ntrs.nasa.gov/citations/20080017096>
- Wu, T., Wang, Y., Qi, W., Luo, X., Luo, P., Gao, X., & Song, Y. (2026). Predictive constitutive modelling of oxidation-induced degradation in 2.5D woven C/SiC composites. *Materials*, 19(2), 307. <https://doi.org/10.3390/ma19020307>
- Qu, N., Zhou, W., Zhang, W., Liu, Y., Zheng, L., Cao, D., Tan, M., Zhu, J., & Zhang, X. (2026). Research progress and prospects of ultra-high-temperature ceramics: Experimentation, multiscale simulation and data-driven design. *Nanomaterials*, 16(11), 693. <https://doi.org/10.3390/nano16110693>
- Baier, L., Frieß, M., Hensch, N., & Leisner, V. (2024). Development of ultra-high temperature ceramic matrix composites for hypersonic applications via reactive melt infiltration and mechanical testing under high temperature. *CEAS Space Journal*, 17(4), 635-644. <https://doi.org/10.1007/s12567-024-00562-y>
- Peters, A. B., Zhang, D., Chen, S., Ott, C., Oses, C., Curtarolo, S., McCue, I., Pollock, T. M., & Eswarappa Prameela, S. (2024). Materials design for hypersonics. *Nature Communications*, 15, 3328. <https://doi.org/10.1038/s41467-024-46753-3>
- Bianco, G., Nisar, A., Zhang, C., Boesl, B., & Agarwal, A. (2022). Predicting oxidation damage in ultra high-temperature borides: A machine learning approach. *Ceramics International*, 48(20), 29763-29769. <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2022.06.236>
- Meng, H., Liu, Y., Yu, H., Zhuang, L., & Chu, Y. (2025). Machine-learning-potential-driven prediction of high-entropy ceramics with ultra-high melting points. *Cell Reports Physical Science*, 6, 102449. <https://doi.org/10.1016/j.xcrp.2025.102449>
- Liu, Y., Meng, H., Zhu, Z., Yu, H., Zhuang, L., & Chu, Y. (2024). Exploring mechanical and thermal properties of high-entropy ceramics via general machine learning potentials. *arXiv*, 2406.08243. 査読前のプレプリント. <https://arxiv.org/abs/2406.08243>
- Thomas, A., Durmaz, A. R., Alam, M., Gumbsch, P., Sack, H., & Eberl, C. (2023). Materials fatigue prediction using graph neural networks on microstructure representations. *Scientific Reports*, 13, 12562. <https://doi.org/10.1038/s41598-023-39400-2>
- Zheng, B., Wen, J., Choy, Y.-S., & Fei, C. (2026). Physics-constrained EBSD image inpainting via adversarial graph learning: Bridging crystallographic rules and multimodal deep learning. *Expert Systems with Applications*, 298, 129667. <https://doi.org/10.1016/j.eswa.2025.129667>
- Raissi, M., Perdikaris, P., & Karniadakis, G. E. (2019). Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations. *Journal of Computational Physics*, 378, 686-707. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2018.10.045>
- Chen, L., Li, Y., Ma, Y., Gao, L., & Yu, L. (2025). Multiscale graph equivariant diffusion model for 3D molecule design. *Science Advances*, 11(16), eadv0778. <https://doi.org/10.1126/sciadv.adv0778>
- Xu, P., Wu, Y., Zarei, A., Ahmed, S., Pilla, S., Li, G., & Luo, F. (2025). Physically constrained 3D diffusion for inverse design of fiber-reinforced polymer composite materials. *Composites Part B: Engineering*, 303, 112515. <https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2025.112515>
- Dai, B., Wang, H., & Gui, J. (2026). Property-informed diffusion-based text-to-microstructure generation. *arXiv*, 2606.08150. 査読前のプレプリント. <https://arxiv.org/abs/2606.08150>
- Lu, L., Jin, P., Pang, G., Zhang, Z., & Karniadakis, G. E. (2021). Learning nonlinear operators via DeepONet based on the universal approximation theorem of operators. *Nature Machine Intelligence*, 3, 218-229. <https://doi.org/10.1038/s42256-021-00302-5>
- Lu, L., Pestourie, R., Johnson, S. G., & Romano, G. (2022). Multifidelity deep neural operators for efficient learning of partial differential equations with application to fast inverse design of nanoscale heat transport. *Physical Review Research*, 4, 023210. <https://doi.org/10.1103/PhysRevResearch.4.023210>
- Green, M. S. (1954). Markoff random processes and the statistical mechanics of time-dependent phenomena. *Journal of Chemical Physics*, 22, 398-413. <https://doi.org/10.1063/1.1740082>
- Kubo, R. (1957). Statistical-mechanical theory of irreversible processes. *Journal of the Physical Society of Japan*, 12, 570-586. <https://doi.org/10.1143/JPSJ.12.570>

- Verdi, C., Karsai, F., Liu, P., Jinnouchi, R., & Kresse, G. (2021). Thermal transport and phase transitions of zirconia by on-the-fly machine-learned interatomic potentials. *npj Computational Materials*, 7, 156. <https://doi.org/10.1038/s41524-021-00630-5>
- Zhang, X., Liu, N., Guo, Q., Shi, G., & Wang, Y. (2026). Beyond Boltzmann transport: Green-Kubo prediction of lattice thermal conductivity with machine-learned potentials. *Journal of Chemical Physics*, 164(7), 074101. <https://doi.org/10.1063/5.0297462>
- Mandal, S., Srivastava, A., Das, T., Singh, A. K., & Maiti, P. K. (2025). Probing lattice anharmonicity and thermal transport in ultralow- κ materials using machine learning interatomic potentials. *Small*, 22(8), 2513476. <https://doi.org/10.1002/sml.202513476>
- Arabha, S., Shokri Aghbolagh, Z., Ghorbani, K., Hatam-Lee, S. M., & Rajabpour, A. (2021). Recent advances in lattice thermal conductivity calculation using machine-learning interatomic potentials. *Journal of Applied Physics*, 130(21), 210903. <https://doi.org/10.1063/5.0069443>

第6章 金属積層造形（LPBF/DED）プロセスの熱応力モデリングおよびインシトゥ（In-situ）欠陥認識

はじめに

台所でケーキを焼く場面を思い浮かべてみよう。小麦粉の生地を型に流し込み、オーブンに入れば一つの塊ができあがる。このように材料を型に流し込んで一度に作る手法は古くからの製造法である。ロケットの部品も長い間、このような方法で作られてきた。大きな金属の塊を切削加工するか、複数のピースを別々に作って接合していた。

しかし、ロケットエンジンの燃焼室とノズルの内部には、ごく細い冷却流路が数百本も走っている。激しい火炎から壁面を守るには、その流路に冷たい燃料を流さなければならない。このような複雑な内部構造を切削加工で作るのは困難である。ピースを接合すれば、継ぎ目が強度の弱点となる。

金属積層造形は別の道を切り拓く。この手法は金属を一層ずつ積み重ねて部品を製作する。3Dプリンターがプラスチックを一本ずつ押し出して積み上げるように、金属粉末や金属ワイヤーを溶融させて積層する。中空の複雑な流路も一度の工程で作ることができる。継ぎ目がないため、弱点となる箇所も減る。

この手法は自由をもたらすが、新たな懸念も生む。金属を何層も溶かして積み上げる間に、ごく微細な空孔が生じることがある。層ごとに加熱と冷却が繰り返されることで部品が歪むこともある。結晶の形状が方向によって異なり、強度が一方に偏ることもある。こうした欠陥は肉眼では見えにくい。しかしロケット部品においては、わずかな欠陥一つが重大事故につながる。

本章では、人工知能がこの課題をどのように解決するかを見ていく。人工知能は三つの役割を果たす。製造中に欠陥を迅速に検出する。時間のかかる計算の代わりに熱応力と変形を高速に予測する。プロセス条件をその都度変更するのを助ける。この三つを順を追って見ていくと、無欠陥に近いロケット部品を自律的に製造する工場の青写真が見えてくる。

本章で扱う技術の基礎には、一つの思想がある。人工知能だけでも不十分であり、物理モデルだけでも不十分であるという考えだ。データのみを学習した人工知能はノイズに揺らぐ。物理計算のみを用いると計算が遅すぎる。双方を融合させることで、互いの弱点を補い合うことができる。この融合こそが物理情報機械学習（PIML）の核心であり、本章の多様な技術はその実例である。

6.1 ロケット部品を積層して製造する二つの手法

本節で扱う内容

ロケットエンジンの部品を金属積層によって製造する代表的な手法は二つある。一つは薄く敷き詰めた金属粉末の上にレーザーを照射する手法である。もう一つは金属粉末やワイヤーをレーザーの焦点に供給しながら溶融・積層する手法である。両手法は製造する部品のサイズと精度が異なる。

また本節では、ロケットに用いられる三種類の金属を紹介する。三つの金属は性質がそれぞれ異なる。製造時に注意すべき点も異なる。金属が溶融してから凝固する間に内部で何が起きているかを知る必要がある。それによって、後述する人工知能技術がなぜ必要なのかを理解できるようになる。本節では三種類の金属の性質を紹介し、その基礎を築く。

6.1.1 次世代ロケット推進機関と金属積層造形（Additive Manufacturing）

ロケットエンジンは極限の条件下で動作する。燃焼室内の圧力は自動車のタイヤ空気圧の数百倍に達する。燃料が燃焼する場所の温度は3,000度を超える。逆に冷却流路にはマイナス200度近い液体燃料が流れる。一つの部品がこの熱さと冷たさを同時に耐え抜かなければならない。

このような部品を従来の手法で作るには多くの手間がかかる。冷却流路を一つひとつ切削加工し、複数のピースをろう付け（ブレイジング）という方法で接合する。ろう付けは金属の間に別の金属を溶かし込んで接合する手法である。ピースが多くなるほど継ぎ目が増え、製造に数か月を要する。継ぎ目は将来的に漏れや亀裂が発生する箇所になりやすい。

金属積層造形はこの工程を大幅に削減する。レーザー粉末床溶融結合（Laser Powder Bed Fusion; LPBF）は金属粉末を薄く敷き詰める。その上にレーザーを照射する。必要な箇所だけを溶融・結合させ、再び粉末を薄く敷いてさらに溶融させる。この工程を数千回繰り返すことで部品が完成する。流路が密集した燃焼室ライナーのように、小型で精密な部品に適している。

指向性エネルギー堆積（Directed Energy Deposition; DED）は方式が少し異なる。金属粉末や金属ワイヤーをレーザーの焦点に供給しながら溶融させて積層する。筆で絵の具を塗り重ねるように金属を盛り上げるイメージに近い。積層速度が速く、大型部品に適している。直径1メートルを超えるノズルスカートを製造する際にこの手法が用いられる。

両手法にはそれぞれ一長一短がある。レーザー粉末床溶融結合は極めて精密だが速度が遅い。薄い層を数千回敷き詰める必要があるためだ。製造できる部品のサイズもチャンバーの大きさに制限される。一方、指向性エネルギー堆積は高速で大型部品を製作できるが、表面が粗い。製造後に追加の切削仕上げ加工が必要となる。

粉末の品質も結果を左右する。粉末の粒子が均一な球状であってこそ、薄く綺麗に敷き詰めることができる。粒子の大きさが不揃いだと隙間が生じる。粉末が湿気を吸うと製造中に気泡が発生する。そのため粉末は乾燥した状態で保管・管理される。優れた部品は優れた粉末から始まる。

両手法とも、部品を一体構造として作り出す能力を備えている。燃焼室ライナー、インジェクタヘッド、ターボポンプインペラ、大型ノズルを継ぎ目なしに成形できる。アメリカ航空宇宙局（NASA）のロケット推進技術プロジェクト（RAMPT）は、この手法を用いて大型ノズルを製造してきた。公開資料によると、直径約1.5メートル、長さ約1.8メートルの冷却流路付きノズルを90日で積層造形した。このノズルは宇宙打ち上げ機用大型エンジンノズルの65パーセントのサイズである。

同プロジェクトは試験成果も報告している。複数の噴射器と燃焼室、ノズルを統合した開発試験において、長時間の燃焼に耐えた。累積燃焼時間は1万秒を大幅に超え、点火試験も数百回繰り返された。材料を層状に積み重ねて作った部品が、実際のロケット燃焼に耐え得ることを意味する。この成果は、積層造形が実験室の域を超えて飛行用部品へと移行しつつあることを示している。

この手法がもたらす利点は、時間と部品点数の削減にある。従来手法では数百個のピースを個別に製作して接合していた。積層造形はその数百個をわずか数個に減らす。ピースが減れば継ぎ目が減り、製造時間も短縮される。設計を変更したい場合も迅速に再試作ができる。この迅速性が新エンジンの開発スピードを飛躍的に向上させる。

6.1.2 合金別の冶金学的特性および相変態挙動

ロケット部品に用いる金属は、それぞれ果たすべき役割が異なる。本節では三つの代表的な金属を考察する。インコネル718、GRCop-42、C-103である。冶金学とは金属の内部構造とその変化を扱う学問である。同一の金属であっても、どのように冷却されるかによって内部構造が変化する。

三つの金属はそれぞれ異なる部位を受け持つ。インコネル718は力を受ける強靱な部品を受け持つ。GRCop-42は熱を素早く逃がす燃焼室壁面を受け持つ。C-103は火炎に直接触れるノズル先端部を受け持つ。一つのエンジンの中で三つの金属が役割を分担する。そのため、各金属を適切に製造するための冶金学が不可欠となる。

インコネル718はニッケル基超合金である。超合金とは高温下でも強度を維持するように作られた合金である。この金属はターボポンプ、バルブ、高圧配管に広く用いられる。高強度で溶接性に優れ、高温にもよく耐える。そのため、エンジンの荷重を受ける部品に適している。

問題は急速冷却によって生じる。レーザーで溶融した金属は瞬く間に凝固する。この際、ニオブやモリブデンといった元素が結晶粒界に集まる。この偏りをミクロ偏析と呼ぶ。偏析が著しいと、その場所にラーベス相 (Laves phase) と呼ばれる脆弱な化合物が形成される。この化合物は金属を強化する元素を奪い、強度を低下させる。

そのためインコネル718は、製造後に熱処理が必要となる。部品を再び高温に加熱して脆弱な化合物を溶融・消失させる。その後、温度を下げて極めて微細で均一な強化粒子が生成するように誘導する。この工程を経ることで、疲労に強い部品となる。疲労とは、繰り返しの力を受けて徐々に亀裂が入る現象である。

この強化粒子には名前がある。ニッケルとニオブが形成するごく微細な相で、ガンマダブルプライムと呼ばれる。化学式ではニッケル3個にニオブ1個が結合する。インコネル718の強度は主にこの相によってもたらされる。他のニッケル基超合金で一般的なガンマプライムとは異なる相である。そのため、ニオブを適切に制御することがこの金属の鍵となる。

GRCop-42はNASAがロケット燃焼室用に開発した銅合金である。銅は熱を非常によく伝える。燃焼室壁面から高温の熱を素早く逃がすにはこの性質が必要である。しかし純銅は高温になると軟化する。そのため銅の中にクロムとニオブをごく微量添加する。これら二つの元素がごく微小な粒子を形成し、銅組織の強度を保持する。

GRCop-42をレーザーで製造する際には困難が伴う。銅は光を強く反射する。鏡のようにレーザー光の大部分を跳ね返してしまう。そのため十分に溶融させるには、高出力レーザーやグリーンレーザーが必要となる。製造後には、高温・高圧で加圧して内部の空孔を除去する工程を経る。この工程を経ることで、800度を超える高温環境でも熱をよく伝え、強度を維持する。

燃焼室の壁面がなぜこれほど熱を逃がさなければならないのかを整理してみよう。壁面の一方には3,000度を超える火炎が触れる。もう一方には冷たい燃料が流れる。この薄い壁が二つの温度を隔てている。熱を素早く排出できなければ、壁面が溶けるか亀裂が入る。そのため、熱伝導性に優れた銅合金が壁面材料として用いられる。

この合金は冷却流路と組み合わせられる。壁の内部に細い流路を密集して配置する。その流路に燃料を流して壁面の熱を運び去る。流路構造が複雑であるほど熱を均一に逃がすことができる。このような複雑な流路を一度に作製できる能力が積層造形にある。材料と製造手法が互いの長所を生かし合っている。

C-103はニオブを基材とした耐熱合金である。ニオブの融点は2,000度を優に超える。そのため、火炎に直接触れるノズル先端部や姿勢制御スラストに用いられる。ここにハフニウム、チタン、ジルコニウムを微量添加して特性を調整する。大型の薄肉ノズルを製造する際にはDED法が用いられる。

C-103は製造時に大気との接触に注意しなければならない。溶融したニオブは大気中の酸素と窒素を急速に吸収する。酸素が一定量を超えると金属が脆くなる。ガラスのようにパキッと割れる性質に変化してしまう。そのため製造チャンバー内をアルゴンのような保護ガスで満たし、酸素を極めて低く抑制する。

使用中においても酸化が大きな問題となる。高温の排ガス中の酸素がニオブを絶えず攻撃する。そのため表面にケイ素を含んだシリサイド保護膜を被覆する。この膜が酸素と金属の接触を防ぐ。製造時の雰囲気管理と使用時の保護膜の双方が不可欠である。この二つの管理がC-103部品の成否を分ける。

近年の研究では、この金属の製造プロセスの解明が進んでいる。ある2025年の研究では、レーザーワイヤー堆積によりC-103薄板を製造し、その特性を評価した。別の研究では、複数の物理現象を同時に解く溶融池モデルを用いて欠陥マップを作成した。どのような条件下で欠陥が発生するかを事前に描いておくのである。このようなマップがあれば、最適な条件を選択して用いることができる。製造前に欠陥を回避する道を見出すことができる。

6.2 インシトゥ (In-situ) 欠陥認識メカニズムと物理情報画像モデル

本節で扱う内容

インシトゥとは、製造を行っているまさにその場で観察するという意味である。部品が完成した後に欠陥を発見してもすでに手遅れである。製造中に欠陥を検出すれば、その場で修正するか停止することができる。本節では、製造中に欠陥を検出する手法を扱う。

まず欠陥がなぜ、どのように発生するかを考察する。次に、レーザーが形成する微小な水たまりを観察する装置を紹介する。最後に、観察された画像を人工知能がどのように読み解くかを見る。ここで物理法則と人工知能を融合して用いる手法が登場する。この手法こそが、本書全体を貫く物理情報機械学習（PIML）の一例である。

6.2.1 溶融池の欠陥形成における熱流体力学メカニズム

レーザーが金属粉末を溶融させると、微小な水たまりができる。この水たまりを溶融池（Melt pool）と呼ぶ。その直径は髪の毛数本分程度と極めて小さい。レーザーが移動すると、この溶融池も共に移動する。部品の品質は、この微小な溶融池の状態に大きく左右される。

この溶融池の内部では、金属が絶え間なく流動している。高温の場所と比較的低温の場所とで表面張力が異なる。その張力差が溶融した金属をあちこちに押し流す。この流れをマランゴニ対流と呼ぶ。汁物の入った鍋の表面で渦が巻く様子に似ている。この渦が欠陥を生み出すこともあれば、逆に欠陥を解消することもある。

欠陥の一つはキーホール気孔（Keyhole porosity）である。レーザーが強すぎたり、移動速度が遅すぎたりすると生じる。強い光が金属を深く掘り進み、鍵穴のように狭く深い窪みを作る。この窪みは不安定で、突然崩壊する。崩壊する際に内部の気体が金属内に閉じ込められ、丸い気泡となる。このように閉じ込められた気泡がキーホール気孔である。

キーホールは悪いことばかりではない。適切な深さのキーホールは金属を深く溶かし、しっかりと接合させる。問題はキーホールが深すぎて不安定になる時である。そのため、プロセスではキーホールの深さを適切に保とうと努める。レーザー出力を高すぎず低すぎず、適切なウィンドウを見出す。適切なウィンドウを見出すことがプロセス管理の核心である。

もう一つの欠陥は融合不良（Lack-of-Fusion; LoF）である。キーホールとは逆に、レーザーが弱かったり走査パス間の間隔が開きすぎたりする時に生じる。隣り合うレーザーパスや下層同士が適切に溶融接合しない。その間に隙間が残る。この隙間は形状が鋭利で、内部に未溶融の粉末が残っている。

二つの欠陥は危険性の性質が異なる。キーホール気孔は丸みを帯びているため相対的に危険性が低い。融合不良は鋭利であるため、その先端に応力が集中する。尖ったガラス片の先端が割れやすいのと同じ理屈である。そのため、融合不良は疲労亀裂の起点になりやすい。ロケット部品は無数の振動を受けるため、この欠陥が大きなりスクとなる。

最近の研究では欠陥をより細かく分類して考察している。ある2026年の研究では気孔を3種類に分類した。気孔なし、15マイクロメートル未満の気孔、それより大きい気孔である。この15マイクロメートルはその研究が定めた分類境界である。その研究では大きなキーホール気孔のほうがより有害であった。微小なガス気孔はその条件下では有害性が低かった。この研究はフォトダイオード信号と精密なX線画像を併用してこの分類を学習させた。

ただし、この境界をそのまま合否判定の基準にしてはならない。気孔の危険性は大きさだけで決まるものではない。気孔の位置、形状、受ける応力、材料、要求寿命が総合して決定する。同じ大きさであっても表面近傍にあればより危険である。そのため、分類境界と構造安全基準は区別して見なければならない。

このように欠陥を細かく分類する理由がある。すべての気孔を一律に扱えば、健全な部品までも不良品として廃棄することになる。逆にすべてを無視すれば、危険な気孔を見逃してしまう。欠陥の種類と大きさを判別してこそ適切に対処できる。人工知能がこの微細な判別を担う。

欠陥は目に見える前兆を残す。キーホールが発生する直前に溶融池の形状が揺らぐ。池が深く狭くなるパターンが現れる。人間の目ではこの急激な変化を捉えきれない。毎秒数万コマを撮影するカメラと人工知能がこの

前兆を読み取る。欠陥が発生する前に事前に検知することが目標である。

粉末の飛散も欠陥と絡み合っている。飛散とは、レーザーが強く照射された際に熔融金属が飛び散る現象である。飛び散った液滴がまだ溶けていない粉末の上に落ちる。その位置に次のレーザーが照射されると適切に熔融しない。そのため、飛散が頻発すると融合不良が増加する。飛散の度合いも欠陥を事前に知らせる兆候となる。

6.2.2 熔融池の温度を測定する眼と物理基準線

熔融池を観察するには特別な眼が必要である。池は非常に明るく、極めて速く変化する。パイロメトリー (Pyrometry) は、高温の物体が発する光によって温度を測定する方法である。物体が高温であるほど異なる光を発する原理を利用する。この方法は物体に接触することなく温度を測定する。

同軸 (Coaxial) パイロメトリーは、レーザーの光路と同じ方向から光を捉える。レーザーとカメラが同一のレンズを共有する形となる。そのため、レーザーがどこを通過しても常に熔融池を正面から観察できる。毎秒数万コマを撮影する高速カメラが熔融池の輝度と形状の変化を記録する。2波長の光を比較することで、表面状態の影響を受けにくい温度を得ることができる。

この2波長法も完全ではない。放射率とは物体が光を放射する度合いを意味する。この手法は2つの波長における放射率の比率が一定であると仮定する。この仮定が崩れると、測定温度に誤差が生じる。飛散した金属蒸気や汚れたレンズも測定値を狂わせる。そのため、測定値を定期的に校正する。

カメラだけでは不十分である。何が正常で何が異常であるかを比較する基準が必要である。その基準の一つとしてローゼンタール (Rosenthal) 熱伝導モデルが挙げられる。このモデルは1946年に発表された歴史ある物理理論である。移動熱源が金属を加熱する際の温度分布を手計算で解いた公式である。

ローゼンタールモデルはおおまかな下絵にすぎない。金属を半無限体と見なし、熱源を点熱源として設定する。金属の物性が温度によらず一定であると仮定する。熔融や蒸発の際に出入りする潜熱も無視する。熔融金属の流動や蒸発挙動も反映できない。

したがって、この公式はおおよそその基準温度を与えるのみである。キーホールが崩壊する急激なダイナミクスはこの公式では説明できない。より精密な基準が必要な場合は有限要素法解析や流体計算を用いる。ローゼンタールモデルの値をリアルタイム監視のベースラインとして直接適用した事例はまだ稀である。ここでは、物理的基準の一つ設けるという考え方の例として取り上げている。

人工知能はこのような不一致を入力として受け取ることができる。実際の温度場と物理基準との差異を学習して欠陥を予測する。物理基準があれば、人工知能が学習すべき負荷が軽減される。データが少なくても物理法則が道案内をしてくれるからである。物理基準が人工知能の学習負担を軽減してくれるのである。

なぜリアルタイム性がこれほど重要なのか。レーザーは毎秒数メートルの速度で走査する。1層を積層するのに要する時間は短い。欠陥が生じた箇所はすぐに次の層で覆われる。覆われる前に検知してこそ、その箇所を修復できる。したがって、判定はミリ秒単位で高速でなければならない。

観察装置も進化を続けている。最近の研究では、1台のカメラで2波長を同時に捉える手法が提案された。この手法は毎秒最大10万コマまで熔融池の温度変化を捉える。このようにして得られた精密な温度画像は、気孔を多様な方式で判別する基盤となる。このような精密な眼があつてこそ、気孔を正確に判別できる。

6.2.3 物理情報画像モデルの設計原理

いよいよ観察した画像を読み解く段階である。本節では物理を組み込んだ画像モデルの設計原理を提案する。まず広く用いられている画像ニューラルネットワークを概観する。ビジョントランスフォーマー (Vision Transformer) は、画像を小さなパッチに分割して関係性を把握するニューラルネットワークである。写真をパッチワークのように切り分け、各ピースが互いにどのように関係しているかを見る。熔融池画像では、中心の輝度の高い部分、後方に引くテール、飛散した粉末の光がすべて異なる。この関係性を読み取ることで欠陥を判別する。

このニューラルネットワークの強みは、離れた領域同士を結び付ける点にある。溶融池の前方の温度と後方のテールは互いにつながっている。熱がどのように流れるかは、一部分を見ただけではわからない。ビジョントランスフォーマーはすべてのパッチを一度に比較対照する。そのため、溶融池全体の熱流を読み取ることができる。この広い視野が欠陥の前兆を捉えるのに役立つ。

本書はここに熱伝導法則を組み込むことを提案する。人工知能が出力する際に物理法則と整合しているかを自己検証させる。損失関数（Loss function）は人工知能がどれだけ間違っているかを測るスコアである。このスコアに欠陥分類誤差、温度場誤差、物理残差を統合して含めようということである。残差とは方程式からどれだけ外れているかを表す値である。

このように物理を組み込むことには利点がある。カメラ画像には常にノイズが混入する。飛散した粉末が光を遮ることもある。純粹にデータのみを学習したモデルは、こうしたノイズに容易に惑わされる。物理を併せて学習したモデルは熱伝導法則という支えを持つ。画像が多少不鮮明であっても、物理に整合した判断を維持できる。

実際の研究も物理特徴の有用性を裏付けている。ある研究では、赤外線カメラ信号から物理ベースの特徴量を抽出した。この特徴量を用いてインコネル718部品の気孔を検出した。温度の変化プロファイル自体が欠陥の手がかりを含んでいるからである。物理から抽出した特徴量はノイズに強く、物理的意味が明確である。そのため、判断の根拠を説明しやすい。

速度も重要である。造形中にリアルタイムで判断するには瞬時に答えを出さなければならない。2026年のある研究では、事前学習済みニューラルネットワークと従来の分類器を組み合わせた。この手法はニッケル基合金の溶融池画像を約0.95の精度で分類した。1枚を判定するのに要した時間は1.15ミリ秒であった。この研究はまだ査読を経ていない初期研究である。それでも工場の現場で適用できるほど高速な判定が可能であることを示している。

物理を組み込む方式には重み付けの調整が伴う。物理残差の重みを強くしすぎるとデータを十分に学習できなくなる。データばかりを過度に追従すると物理から乖離する。二つの力のバランスをうまく取ってこそ優れたモデルとなる。このバランスポイントを見出す作業が物理情報学習のチューニングである。部品や装置によって適切な重みは異なる。

ここで検証済みの事項と提案事項を区別しておこう。赤外線特徴量による気孔の検出や高速ハイブリッドモデルは、実際の研究が示した成果である。ビジョントランスフォーマーに熱伝導残差を組み込む構造は、本書が提示する方向性である。まだ実際の部品で検証された手法ではない。人工知能が下した判断は、切断断面観察やコンピュータ断層撮影（CT）によって再確認する必要がある。

6.3 大型ノズルの変形を抑える

ノズルスカートはエンジンの後方に取り付けられるラッパ状の大型部品である。薄い板材を円錐状に丸く積層して製作する。このように大きくて薄い部品は、造形中に変形しやすい。本節ではその変形の原因と抑制手法を扱う。

まず部品の内部に応力がなぜ蓄積するのかを考察する。次に、計算速度の遅い数値計算に代わる高速な人工知能モデルを紹介する。最後に、そのモデルを用いてレーザーの走査を制御し、変形を抑える手法を見ていく。大型部品であるほどこの変形管理は難しく、それだけに重要となる。

6.3.1 大型薄板積層における熱応力の蓄積と座屈変形

残留応力（Residual stress）とは、部品内部に残存する引張および圧縮の力である。目には見えないが、常に内部で作用している。この力がどのように発生するのかを思い描いてみよう。レーザーが金属の1本のラインを加熱すると、その部分は膨張する。加熱された金属が熱膨張するためである。

レーザーが通過すると、そのラインは再び冷却される。冷却されると元の状態に収縮しようとする。しかし下層はすでに凝固しているため、この収縮の動きを拘束する。収縮しようとする力と拘束する力が拮抗し、内部

に応力が残る。上部には引張応力が、下部には圧縮応力が蓄積される。

薄肉かつ大型のノズルスカートでは、この応力が大きな問題を引き起こす。紙の片側だけを引っ張るとしわが寄って歪むのと似ている。部品が半径方向にねじれたり、薄い板が突然座屈したりする。この急激なたわみを座屈（Buckling）と呼ぶ。深刻な場合は部品がベースプレートから剥離することもある。

大型部品であるほど管理はより困難になる。層が数百層に達すると、熱が連続して蓄積されるためである。最初の数層を積層する時と、後段の数層を積層する時とは温度状態が異なる。同一のレーザー条件を適用しても結果が変わってしまう。したがって、大型部品では熱状態を監視しながら条件を動的に変更していかなければならない。

C-103のようなニオブ合金では、この問題がさらに困難となる。融点が高く、多大な入熱を加えなければ溶融しないためである。大きな入熱は大きな応力へと直結する。大型ノズルをこの金属で製作する際、変形管理が成否を分ける。熱解析とパス設計を初期段階から統合して構築しなければならない。

変形は造形後に修正することが極めて困難である。すでに固まった部品を無理に矯正しようとすれば、新たなクラックが生じる。そのため、造形中に応力が蓄積しないよう未然に防ぐことが賢明である。病気にかかってから治療するよりも予防するほうが良いのと同じである。この予防こそが人工知能による予測と能動的制御の担う役割である。後に述べるサロゲートモデルがその予防を支援する。

6.3.2 熱力学ベースのサロゲートモデル（Surrogate Model）

部品内部の応力を事前に把握するには計算が必要である。有限要素法解析（Finite Element Analysis）は、部品を微小要素に分割して温度と応力を計算する手法である。非常に高精度であるが、大型部品では膨大な時間を要する。数百万個の微小要素を一つひとつ解かなければならないからである。大型ノズルの解析1回に数日を要することもある。

この計算速度の遅いシミュレーションを代替するのがサロゲートモデル（Surrogate model）である。サロゲートモデルは、時間のかかる計算結果をあらかじめ学習しておく高速なモデルである。多層パーセプトロン（Multilayer Perceptron; MLP）が頻繁に用いられる。複数の層を経て入力を入力へと変換する基本的なニューラルネットワークである。高精度な解析結果を大量に学習した後、新たな条件における結果を予測・推定する。

このモデルは何を受け取り、何を出すのか。入力にはレーザー出力、移動速度、レーザーの走査経路、層間の待機時間である。出力は部品全体の残留応力分布と最終変形形状である。精密解析なら数日かかる計算を、このモデルは短時間で概算する。多様な条件を迅速に比較検討できるようになる。

速さは新たな道を切り開く。条件を1つ変えるたびに数日待たなければならないようでは、優れた設計を見つけることは難しい。概算であっても高速であれば、何千もの条件をあらかじめスクリーニングできる。有望な候補だけを選び出し、精密解析で再確認する。サロゲートモデルは、膨大な候補を絞り込む網の役割を果たす。

サロゲートモデルが適切に学習するためには、良質なデータが豊富に必要である。精密解析を様々な条件であらかじめ実行してデータを収集する。実際に部品を製作して得た測定値も併せて投入する。データが広範かつ均一であるほど、概算の精度は高まる。学習したことのない未知の条件では概算が狂いやすい。そのため、サロゲートモデルは学習した範囲内でのみ信頼して使用する。

最近の研究はこの方向で成果を上げている。ある2025年の研究では、機械学習を用いて残留応力を迅速に概算し、変形を低減させた。この研究では、ブリッジ形状の試験片の反りが大幅に減少したと報告された。予測された応力と精密解析との差も小さかった。高速なモデルが精密解析に匹敵する精度に近づいたことを意味する。

物理情報を組み込むことで、さらに性能が向上する。別の2025年の研究では、物理法則をニューラルネットワークに組み込み、大型部品の変形をほぼリアルタイムで予測した。ニューラルオペレーター（Neural Operator）という構造を用い、多様な条件に広く適合するように学習させた。この研究はまだ査読を経ていない初期の

研究である。それでも、高速な予測と物理的整合性を両立させる道筋を示している。

6.3.3 スキャン軌道と層間冷却時間のアクティブ最適化

今や予測に基づいて実際のプロセスを変更する段階である。スキャン軌道（Scan path）は、レーザーが移動する方向と順序である。レーザーを一方方向にのみ走査し続けると、熱が片側に偏る。偏った熱は大きな残留応力を生む。そのため、方向を変えながら熱を均一に拡散させる。

数々の工夫された軌道が考案された。広い面を小さな領域に分割して交互に充填する方法がある。領域ごとにレーザーの照射方向を少しずつ回転させる方法もある。空間を稠密に埋めながら進む曲線パスも用いられる。目的は1つである。熱の流れを全方位に均等に分散させ、局所的な偏りを防ぐことである。

層間の待機時間も重要である。前の層がまだ高温であるうちに次の層を積層すると、熱が幾重にも蓄積する。蓄積した熱は大きな変形を引き起こす。そのため、前の層がある程度冷めるのを待つ。この待機時間を層間冷却時間と呼ぶ。

アクティブ最適化（Active optimization）は、これらの条件をプロセス進行中に変更する手法である。パイロメトリーが現在の部品の温度をリアルタイムで知らせる。サロゲートモデルが次のパスにおける応力リスクを迅速に予測する。これら2つを参照し、レーザー出力、走査速度、待機時間をその都度調整する。人間の長年の経験を数値とルールへと落とし込む過程である。

調整手法も高度化している。ベイズ最適化（Bayesian Optimization）は、少ない試行回数で優れた条件を探索する手法である。すでに試行した結果に基づいて、次に試すべき条件を賢明に選択する。遺伝的アルゴリズム（Genetic Algorithm）は、優れた条件同士を掛け合わせてより良い条件を探索する手法である。このような手法によって、待機時間を前の層の熱状態に合わせて動的に変更する。

この調整は層ごとに異なっていく。下層はベースプレートに熱を奪われて速やかに冷却される。上層に進むにつれて熱が逃げにくくなる場合もある。このようなときは上層での待機時間を延長する。ただし、これは一例にすぎない。熱の蓄積の度合いは、部品の形状やベースプレート、層の面積、積層順序によって異なる。そのため、センサーで層ごとの熱状態を監視しながら待機時間を決定する。

この方式が適切に機能すれば、変形は著しく低減する。応力が均一に分散し、最大応力が低下する。部品は許容公差内に収まる。ただし、この調整は常に安全なプロセスウィンドウ内で行わなければならない。センサーの遅延、モデルの誤差、装置の応答限界を考慮する必要がある。試験片であらかじめ確認して初めて、実際の部品へと適用できる。

デジタルツインという発想もここから生まれる。デジタルツインとは、実際の部品の双子をコンピュータ内に構築することである。実際のプロセスにおけるセンサー値をその双子に絶えず投入する。双子は現在部品の内部で何が起きているかを忠実に反映する。次の層でどのようなリスクが生じるかも事前に提示する。サロゲートモデルは、この双子が迅速に思考できるよう支援する頭脳である。

6.4 結晶形状を制御する

金属が凝固する際、内部で結晶が成長する。この結晶の形状が部品の強度を左右する。結晶が一方方向にのみ長く成長すると、強度に方向依存性が生じる。本節では、結晶の形状を意図通りに制御する手法を扱う。

まず、結晶の2つの形状とその違いについて検討する。次に、プロセス条件から結晶形状を描き出す生成モデルを紹介する。最後に、造形中に結晶形状を自律的に制御する強化学習制御を取り上げる。目に見えない結晶の世界が、部品の運命を決定づける。

6.4.1 柱状晶と等軸晶の遷移（CET）と機械的異方性

金属が凝固する際、結晶は主に2つの形状で成長する。柱状晶（Columnar grain）は、柱のように一方方向へ長く成長した結晶である。木の柱を何本も並べて立てた姿に近い。等軸晶（Equiaxed grain）は、四方八方にほぼ同じ大きさで成長した結晶である。砂利を一様に敷き詰めた姿に近い。

この違いが部品の性質を決定づける。柱状晶が多いと、柱の伸びる方向には強いが横方向には弱くなる。方向によって強度や疲労寿命が異なる。この性質を異方性（Anisotropy）と呼ぶ。木目に沿っては簡単に割れ、横方向断ちには割れにくい木材と同じ理屈である。

ロケット部品において、異方性は懸念材料となり得る。部品は多方向から力を受けるためである。一方向のみが強くても、強度の低い方向から先に亀裂が入る。等軸晶はこの問題を軽減する。全方位に均一に強く、凝固割れにも強い耐性を示す。そのため、多方向から荷重を受ける部品では等軸晶が有利である。

ただし、等軸晶が常に優れているわけではない。クリープや熱疲労が問題となる部品では、柱状の結晶のほうが適している場合もある。クリープとは、長時間の応力を受けて材料が徐々に塑性変形する現象である。熱が一方向にのみ流れる部品では、方向性を持つ結晶が有利に働くこともある。部品が受ける負荷に応じて、求められる結晶形状は異なる。

積層造形では柱状晶が形成されやすい。レーザー照射後の熱が積層方向に逃げるためである。熱が抜ける方向に沿って結晶が柱のように成長する。その結果、積層方向に沿って結晶が整列する。このように結晶の方位が一方向に揃った組織を集合組織と呼ぶ。この配向性を必要に応じて制御することが本節の目標である。

結晶の形状は主に2つの値に大きく左右される。温度勾配（Temperature gradient; G ）は、温度変化の急峻さを意味する。位置によって温度がどれほど急激に変化するかを示す。凝固速度（Solidification rate; R ）は、液相と固相の境界が移動する速度である。これら2つの値がそれぞれ異なる役割を果たす。

両者の比である G/R は結晶の形状を決定する。この比が大きいと柱状晶になりやすく、小さいと等軸晶へと傾く。両者の積である $G \times R$ は冷却速度を表す。この値が大きいほど結晶粒は微細化する。したがって、形状とサイズを個別に制御できる。レーザー出力や走査速度を変更すると、これら2つの値が同時に変化する。

形状を決定するのはこれら2つの値だけではない。核生成の起点となる微粒子、溶融金属の流動、再溶融の度合いも影響を及ぼす。下層ですでに成長した結晶の方位も引き継がれる。そのため、温度勾配が低く凝固が速いほど等軸晶が形成されやすいものの、常にそうなるわけではない。複数の因子を総合的に考慮してこそ、結晶形状を適切に制御できる。

柱状晶から等軸晶へと変化する境界が存在する。この変化を柱状晶・等軸晶遷移（Columnar-to-Equiaxed Transition; CET）と呼ぶ。温度勾配と凝固速度がある条件を満たすと、この遷移が生じる。この条件を把握すれば、所望の結晶形状に近づくことができる。古典的な理論がこの境界を数式として定式化している。

最近の研究はこの境界をより精密に洗練させている。2025年のある研究では、合金組成に基づいてCETを予測する基準が確立された。どの元素が結晶形状に大きな影響を与えるかを機械学習によって明らかにした。組成をわずかに変更するだけでも結晶形状を制御できることを意味する。プロセスと組成を統合的に扱うことで、結晶制御の可能性が広がる。

組成に着目した機械学習の適用も続いている。どの元素が結晶形状に重大な影響を及ぼすかをデータから見極める。ケイ素や炭素といった元素の含有量が結晶形状を変化させるという結果も得られている。こうした研究が、結晶制御のマップを着実に埋めていく。

6.4.2 プロセス条件から結晶形状を描く生成モデル

プロセス条件から結晶形状をあらかじめ予測・可視化したい。そのためには、条件を入力すると微細組織の画像を生成してくれるツールが必要である。その代表例として条件付き敵対的生成ネットワーク（Conditional GAN）が挙げられる。このニューラルネットワークは、条件を与えることで所望の画像を生成するモデルである。ここでの条件とは、レーザー出力、走査速度、温度勾配、凝固速度などのパラメータである。微細組織制御にこのモデルを適用する試みは、まだ提案段階にある。

このモデルは2つの構成要素が競い合いながら学習を進める。生成器（Generator）は微細組織の画像を生成する。識別器（Discriminator）はその画像が本物か偽物かを判別する。生成器は識別器を欺こうとし、識別器は見破ろうと努める。この競合を繰り返すことで、生成器は次第に本物そっくりの画像を描き出すようになる。

偽造者と鑑定士が互いに腕を磨き合う構図に近い。

ここで本物の画像とは、電子線後方散乱回折（EBSD）像である。この手法は電子顕微鏡を用いて結晶の方位を読み取る。結晶ごとにその方位を色分けし、マップのように可視化する。生成器はこのマップを模倣するように学習する。条件を入力すると、その条件下で生じる結晶配向マップを描き出す。

このモデルの学習が成功すれば、極めて有用である。設計者がプロセス条件を変更した際、結晶がどのように変化するかを事前に確認できる。実際に部品を造形して切断・観察しなくても推測が可能になる。時間と材料を大幅に節約できる。多様な条件を画面上で比較し、最適な条件を選択できる。

実際に結晶マップを取得するには多大な労力を要する。部品を切断し、表面を精密に研磨しなければならない。電子顕微鏡で各点の結晶方位を1箇所ずつ読み取る必要がある。広い面積全体を測定するには長時間を要する。生成モデルは、この時間のかかるプロセスを劇的に短縮する近道となる。むしろ、その近道は実際の測定によって時折検証されなければならない。

注意すべき点もある。生成モデルはそれらしい画像を生成することに長けている。しかし、もっともらしさが直ちに物理的真実を意味するわけではない。画像が見かけ上整っていても、実際とは異なる可能性がある。そのため、結晶粒径、方位分布、相分率などの物理指標を併せて検証する。これらの指標が実態と一致して初めて、画像を信頼することができる。

損失関数に物理的制約を組み込むことで、信頼性はさらに向上する。生成された画像の結晶粒径が実際の分布から逸脱した場合にペナルティを与える。こうすることで、生成器が物理法則に整合した画像を描くよう誘導する。見栄えの良い画像と正確な画像との間の乖離を縮める。生成モデルも物理という尺度を当てて検証してこそ、ロケット部品に適用できる。

6.4.3 造形中に結晶形状を制御する強化学習

今や造形中に結晶形状を自律的に制御する段階である。強化学習（Reinforcement Learning）は、試行錯誤と報酬を通じて最適な行動を学習する手法である。幼児が転びながら歩き方を覚える過程に似ている。望ましい行動には報酬を与え、望ましくない行動にはペナルティを課す。報酬を多く得られる行動の頻度を次第に高めていく。

積層造形における行動とは、レーザーの制御である。レーザー出力をどれだけ増減させるか、走査速度をどのように変更するかが行動に相当する。ただし、結晶形状は造形中に直接観察することはできない。そのため、溶融池の温度と形状を代わりに監視する。これらの値から結晶形状を推測する。パイロメトリーがこの状態をリアルタイムで知らせる。

報酬は目標にどれほど近づいたかによって決定される。所望の結晶形状に近いほど大きな報酬を与える。等軸晶の割合が目標値に達すれば報酬は大きくなる。逆に、キーホールや溶融不良が発生すればペナルティを課す。この報酬を追求することで、人工知能はレーザー制御を学習していく。

報酬をどのように設計するかが成否を分ける。報酬を大雑把に設計しすぎると、見当違いの方向へ進んでしまう。結晶形態ばかりを追求してエネルギーを浪費することもある。そのため結晶形態、欠陥、エネルギーをあわせて考慮して報酬を設計する。複数の目標を天秤にかけてバランスを取るのである。この天秤を適切に設計することが、強化学習設計の核心である。

なぜこのようなリアルタイム制御が必要なのか。部品の形状が部位ごとに異なるためである。角、薄肉部、突出部は熱が逃げる速度が異なる。同じレーザー条件を与えても、部位によって結晶形態が変わる。リアルタイム制御は部位ごとに条件を変え、結晶形態を均一に保とうとする。

この方向性はまだ産業標準ではない。シミュレーションや試験片段階での提案が多い。リアルタイムで結晶形態を閉ループ制御した事例は稀である。結晶形態をプロセス中に直接測定することが難しいためである。センサの遅延、モデルの誤差、装置の応答限界も同時に克服しなければならない。

強化学習は、危険な試行をあらかじめ経験することに長けている。実機で不良条件を試せば部品を廃棄することになる。コンピュータ内の模擬実験であれば、いくら失敗しても問題ない。数多くの失敗から適切な制御を事前に学習する。学習後は安全な範囲内で実機に慎重に適用する。失敗のコストをコンピュータが代わりに支払っているわけである。

したがって順序が重要である。まずシミュレーションで制御を習得する。次に限定された試験片で確認する。検証されたプロセス範囲内で補助ツールとして用いる。この段階を踏んでこそ、強化学習制御を実部品に慎重に導入できる。結晶形態は造形後にEBSDで再確認し、制御が適切であったかを点検する。

6.5 音で内部を聴く欠陥監視

ここまでは光で欠陥を検出してきた。しかし光は表面しか見えない。部品内部の深部で発生する亀裂はカメラで捉えにくい。本節では音で内部を聴く手法を扱う。

まず欠陥がどのような音を発するかを調べる。次にその音を画像に変換する手法を見る。最後に音と光を併用してより正確に判断する手法を見る。異なる感覚を統合すれば、一つの感覚が見落としした情報を補い合える。

6.5.1 広帯域アコースティック・エミッション（AE）信号の物理メカニズム

音響放出（Acoustic Emission; AE）は、材料内部で急激な変化が起こるときに発生する音である。正確には微小な弾性波である。ガラスのコップにひびが入るときにパキッと音がするのと原理は同じである。木がしなって折れるときにパキパキと音を立てるのとも同じである。材料内部の事象が音として漏れ出てくるのである。

積層造形では、様々な事象がそれぞれ異なる音を発する。高温割れは大きなエネルギーを瞬時に放出する。そのため高周波の鋭い音を出す。短くパチッとはじける音に近い。このような音は振幅が大きく、突発的に立ち上がる。

キーホールが崩壊する際にも音が発生する。溶融池内の空洞が急激につぶれて衝撃を与える。この音は亀裂よりもやや低い周波数で連続して揺らぐ。水中で気泡がつぶれるときに生じる揺らぎに似ている。音の質感が亀裂とは異なる。

粉末の飛散（スパッタ）や装置の接触時にも音が発生する。この音はさらに低い周波数帯にある。欠陥ではない正常なノイズも音として混ざり込む。そのため音を適切に聞き分けなければならない。欠陥の音と単なるノイズを識別することが核心である。

音ごとに異なる特徴を持つことには理由がある。大きなエネルギーが一気に解放されると高周波成分が乗る。ゆっくりと解放されると低周波成分が乗る。亀裂は一瞬で生じるため高い音を出す。粉末の飛散は相対的に遅いため低い音を出す。ただし実際に検出される周波数は、センサや伝播経路、フィルタリングの手法によって異なる。したがってこの順序は、特定の試験で観察された傾向として捉えるべきである。

音を聴く手法には大きな強みがある。光は表面しか見えないが、音は内部を通過してくる。造形体深部の亀裂も音によって捉えることができる。亀裂が最初に発生した瞬間を検知できれば迅速に対応できる。その場でプロセスを停止し、部位を記録して再検査を行う。レーザーを再度照射して溶融し直す補修を思い浮かべるかもしれない。しかし再溶融が常に亀裂を除去できるわけではない。新たな熱応力と新たな亀裂を招く可能性もある。検証された補修プロセスと、単なる再溶融は区別して考えるべきである。

音を聴く手法には2通りある。一つは部品に接触させる圧電センサで聴く手法である。圧電センサは力を受けると電気を発生する素子である。部品を支持するベースプレートに取り付け、内部を通過してきた弾性波を検出する。もう一つは空気中の音をマイクロフォンで聴く手法である。両手法は音の伝播経路や周波数特性が互いに異なる。

6.5.2 時間周波数ウェーブレット変換

音響信号をそのまま見ても判断は難しい。時間に伴う振動波形だけではどのような欠陥なのか把握しにくいのである。同じ瞬間に様々な高低の音が重なり合っているからである。いつ、どのような周波数の音が発生し

たのかを同時に見なければならない。そうして初めて欠陥の指紋を読み取ることができる。

ウェーブレット変換（Wavelet Transform）がこの役割を果たす。この手法は時間と周波数を同時に表現する手法である。音響信号を、横軸が時間、縦軸が周波数（高低）である画像に変換する。この画像をスケーログラム（Scalogram）と呼ぶ。楽譜が時間と音の高さを同時に示すのと似ている。

この画像は欠陥ごとに異なるパターンを描き出す。亀裂の鋭い音は高周波域に明るい点として現れる。キーホールの揺らぎは中周波域に連続したパターンとして現れる。ノイズは低周波域にぼんやりと広がる。このように音が画像化されると、視覚的な比較が容易になる。

パターンを読み取る際にはマザーウェーブレットを適切に選択しなければならない。マザーウェーブレットは音を比較する基準となる短い波形である。音の性質と似た基準を用いてこそパターンが鮮明になる。性質の異なる基準を用いるとパターンがぼやけてしまう。適切な基準を選ぶことも前処理の一環である。適切な基準を選択してこそ、パターンの鮮明な画像が得られる。

人工知能はこの画像からパターンを学習する。画像を読み取るニューラルネットワークがスケーログラムを読み取る。どのようなパターンがどのような欠陥であるかを、数多くの事例から学習する。学習後は新しい画像を見て欠陥を判別する。音を画像に変換したことで、画像認識人工知能の能力を活用できるのである。

最近の研究ではこの手法により優れた成果が得られている。ある研究では、空気中の音とレーザー速度だけでキーホールポアを推定した。マイクロフォンで捉えた音をスケーログラムに変換して学習させた。結果の信頼度を示す値は0.8を超えた。この研究は学術誌に掲載された成果である。音だけでも内部欠陥をミリ秒単位で推定できることが示された。

音を聴く手法には、コストが低いという利点もある。高速カメラや精密なX線装置は高価で扱いが難しい。圧電センサは比較的安価で取り付けやすい。複数台を取り付ければ、音がどこから発生したかも推定できる。そのため音に基づく監視は、現場で実用的なアプローチとして注目されている。

複数のセンサで位置を特定する原理は単純である。同一の音がセンサごとに異なる時刻に到達する。近いセンサには早く、遠いセンサには遅く届く。この到達時間差を比較することで、音が発生した位置を推定する。複数のマイクロフォンに届く時間差から方向を割り出すのと同じである。このようにして特定された位置が、欠陥の所在を教えてくれる。

6.5.3 光と音を併用する欠陥認識

マルチモーダル（Multimodal）とは、複数種類のデータを併用するという意味である。人間が目と耳を同時に使うのと同じである。音だけを聴いては見落とすものがあり、光だけを見ていても見落とすものがある。両者を組み合わせることで、互いの隙間を補い合う。本節では音と光を統合する手法を扱う。

光と音では捉える対象が異なる。パイロメトリは表面の温度をよく捉える。音響放出は内部で発生する急激な変化を捉える。表面の温度異常はカメラが先に検知する。内部の亀裂は音が先に検知する。二つの信号を組み合わせることで、表面と内部を同時に監視できる。

統合の手法は次の通りである。音響信号は音響専用のニューラルネットワークが読み取る。光の画像は画像専用のニューラルネットワークが読み取る。二つのニューラルネットワークが抽出した特徴を一つに集約して最終的な判断を下す。それぞれ得意な処理を担当させた上で、最終結論で力を合わせるわけである。

実際の研究がこの統合の有効性を示した。ある研究ではパイロメトリと音響を同時に収集した。二つの信号を統合することで、キーホールポアをよりの確に検出した。単一の信号のみを用いる場合よりも見落とされるポアが減少した。亀裂までこのように同時に捉えることは今後の課題である。

統合する際には何よりも時間合わせ（同期）が重要である。音が発生した瞬間と光が変化した瞬間を正確に一致させなければならない。時間がずれると、異なる事象を同一の事象と誤認するおそれがある。そのため二つのセンサを高精度に同期させる。センサごとにノイズ特性が異なるため、事前の前処理も必要となる。

二つの信号を統合する方式にも多様な手法がある。信号を最初から混合して統合学習させる方式がある。それぞれ個別に学習させた後、最終段階でのみ統合する方式もある。最近の研究では、個別に学習した特徴量を軽量な分類器で統合する方式が好まれる。この方式は計算負荷が低く、新たな欠陥にも適応しやすい。どの方式が適しているかは、部品や装置によって異なる。

複数の感覚を統合する流れは、今後さらに拡大していく。光と音に加えてレーザーの反射信号も利用される。造形層の写真や温度マップも同時に収集される。多数の「目」と「耳」がひとつの部品を幾重にも監視する。感覚（センサ）が多いほど見落とされる欠陥は減少する。これら複数の信号をひとつに束ねる役割を人工知能が担う。

この手法にも明確な限界がある。人工知能の判断は、生産中のアラートや候補のスクリーニングに用いるのが安全である。真の合格判定は非破壊検査、断面観察、コンピュータ断層撮影（CT）によって下される。センサ間の時間ズレやノイズも誤判定を招くおそれがある。人工知能は人間が確認すべき箇所を絞り込んでくれる案内役にすぎない。

まとめ

本章では、ロケット部品を金属積層造形で製作する技術を考察した。レーザーで粉末を熔融積層する手法と、ワイヤを熔融積層する手法を取り上げた。インコネル718、GRCop-42、C-103の3種類の金属の特性と留意点を整理した。各金属は担う任務が異なり、製造時に制御すべき課題も異なる。

積層造形は設計の自由度をもたらす一方で、欠陥のリスクも伴う。キーホール気孔や融合不良は疲労亀裂の起点となる。残留応力は大型部品を変形させる。結晶方位の偏りは強度に異方性をもたらす。これらの欠陥はエンジンの安全性に直結する。

これらの欠陥は互いに複雑に絡み合っている。不適切なレーザー条件ひとつが複数の欠陥を同時に誘発する。キーホールを回避しようとして融合不良を招くこともあれば、応力を低減しようとして結晶形態が悪化することもある。したがって、単一の欠陥のみを見てプロセス条件を変更してはならない。複数の欠陥を同時に天秤にかけ、最適なバランスを見出す必要がある。

人工知能はこの課題に対して3つの方向から支援する。第一に、造形中に欠陥を迅速に検出することである。パイロメトリ画像に物理法則を組み込んだモデルがボアを識別する。音を画像に変換して読み取るモデルが内部亀裂を検出する。光と音を統合すれば、表面と内部を同時に監視できる。

第二に、時間のかかる計算に代わって熱応力と変形を高速に予測することである。サロゲートモデルが数日を要する解析時間を大幅に短縮する。この高速予測により、数多くのプロセス条件を事前にスクリーニングできる。物理情報を組み込むことで、予測が物理的に妥当な範囲から逸脱しない。

最後に、プロセス条件をその都度リアルタイムに変更するよう支援することである。スキャン軌跡と冷却時間を調整して変形を低減する。レーザーを制御して結晶形態を均一に保つ。生成モデルは条件から結晶形態を事前に描き出す。強化学習は造形中に自律的に条件を制御する。

一点明確にしておくべきことがある。人工知能はあらゆる検査を代替できるわけではない。本章で取り上げた様々なモデルは高速で高度であるが、完璧ではない。初期段階の研究が多く、産業標準として確立されたものは少ない。人工知能の判断はアラートや候補のスクリーニングに用いるのが安全である。最終的な品質保証は、試験片、非破壊検査、燃焼試験が一体となって担う。

大規模言語モデルを活用する新たな潮流もある。積層造形分野には論文や報告書が膨大に蓄積されている。大規模言語モデル（Large Language Model; LLM）はこれらの文献を読解し、知識を整理する。どのような条件下でどのような欠陥が発生しやすいかを問い合わせることもできる。ある2025年の研究では、言語モデルを用いて欠陥発生条件を予測する試みが行われた。こうしたツールは、人間の経験と文献知識をつなぐ架け橋となる。

全体像は次の通りである。センサが「目」と「耳」となり、サロゲートモデルが「頭脳」となり、コントローラが「手」となる。これら3つが一体化すれば、部品を自律的に監視しながら製造する工場が実現する。NASAが大型ノズルを積層造形し、長時間の燃焼試験に耐え抜いたことはその出発点である。次章では、このように製造された部品の後加工や、その部品が長期の使用に耐えうるかを評価する手法について考察する。

関連根拠資料

- DebRoy, T., Wei, H. L., Zuback, J. S., Mukherjee, T., Elmer, J. W., Milewski, J. O., Beese, A. M., Wilson-Heid, A., De, A., & Zhang, W. (2018). Additive manufacturing of metallic components: Process, structure and properties. *Progress in Materials Science*, 92, 112-224. <https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2017.10.001>
- King, W. E., Barth, H. D., Castillo, V. M., Gallegos, G. F., Gibbs, J. W., Hahn, D. E., Kamath, C., & Rubenchik, A. M. (2014). Observation of keyhole-mode laser melting in laser powder-bed fusion additive manufacturing. *Journal of Materials Processing Technology*, 214, 2915-2925. <https://doi.org/10.1016/j.jmatprotec.2014.06.005>
- Rosenthal, D. (1946). The theory of moving sources of heat and its application to metal treatments. *Transactions of the ASME*, 68, 849-866.
- Hunt, J. D. (1984). Steady state columnar and equiaxed growth of dendrites and eutectic. *Materials Science and Engineering*, 65, 75-83. [https://doi.org/10.1016/0025-5416\(84\)90201-5](https://doi.org/10.1016/0025-5416(84)90201-5)
- Mukherjee, T., Manvatkar, V., De, A., & DebRoy, T. (2017). Mitigation of thermal distortion during additive manufacturing. *Scripta Materialia*, 127, 79-83. <https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2016.09.001>
- Gradl, P. R., Protz, C. S., Cooper, K., Ellis, D., Evans, L. J., & Garcia, C. (2019). GRCop-42 Development and Hot-fire Testing Using Additive Manufacturing Powder Bed Fusion for Channel-cooled Combustion Chambers. *AIAA Propulsion and Energy 2019 Forum*. <https://doi.org/10.2514/6.2019-4228>
- Gradl, P., Mireles, O. R., Katsarelis, C., Smith, T. M., Sowards, J., Park, A., et al. (2023). Advancement of extreme environment additively manufactured alloys for next generation space propulsion applications. *Acta Astronautica*, 211, 483-497. <https://doi.org/10.1016/j.actaastro.2023.06.035>
- NASA. (2023). Rapid Analysis and Manufacturing Propulsion Technology (RAMPT). <https://www.nasa.gov/rapid-analysis-and-manufacturing-propulsion-technology/>
- NASA. (2023). GRCop-42 additive manufacturing for high heat flux thrust chamber liners (Document ID 20230007103). NASA Technical Reports Server. <https://ntrs.nasa.gov/citations/20230007103>
- NIST. (2024). Additive Manufacturing Benchmark Test Series (AM Bench). National Institute of Standards and Technology. <https://www.nist.gov/ambench>
- NIST. (2022). AM Bench 2022 measurement results data: in-situ thermography and scan strategy laser scans. National Institute of Standards and Technology. <https://www.nist.gov/data-publications/am-bench-2022-measurement-results-data-situ-thermography-and-scan-strategy-laser>
- Levine, L. E., Lane, B. M., Heigel, J. C., et al. (2024). Outcomes and conclusions from the 2022 AM Bench measurements, challenge problems, and conference. *Integrating Materials and Manufacturing Innovation*, 13, 154-193. <https://doi.org/10.1007/s40192-024-00372-4>
- Aydogan, B., & Chou, K. (2024). Review of in situ detection and ex situ characterization of porosity in laser powder bed fusion metal additive manufacturing. *Metals*, 14(6), 669. <https://doi.org/10.3390/met14060669>
- Chen, L., Bi, G., Yao, X., Su, J., Tan, C., Feng, W., Benakis, M., Chew, Y., & Moon, S. K. (2024). In-situ process monitoring and adaptive quality enhancement in laser additive manufacturing: a critical review. *arXiv:2404.13673*. <https://arxiv.org/abs/2404.13673>
- Emmanuel, I., Yang, Z., Yeung, H., & Zhang, X. (2026). Machine learning modeling for real-time melt pool monitoring in laser powder bed fusion additive manufacturing: a hybrid approach. *arXiv:2606.23851*. <https://arxiv.org/abs/2606.23851>
- Liu, H., Guirguis, D., Zeng, X., Maurer, L., Rajan, V., Sanaei, N., Yang, C.-T., Beuth, J. L., Rollett, A. D., & Kara, L. B. (2026). Airborne acoustic emission enables sub-scanline keyhole porosity quantification and effective process characterization for metallic laser powder bed fusion. *Additive Manufacturing*, 116, 105062. <https://doi.org/10.1016/j.addma.2025.105062>
- Tian, M., Mu, H., Ding, D., Li, M., Ding, Y., & Zhao, J. (2025). Real-time distortion prediction in metallic additive manufacturing via a physics-informed neural operator approach. *arXiv:2511.13178*. <https://arxiv.org/abs/2511.13178>
- Zhang, R., Strickland, J., Hou, X., Yang, F., Li, X., de Oliveira, J. A., Li, J., & Zhang, S. (2025). Rapid residual stress simulation and distortion mitigation in laser additive manufacturing through machine learning. *Additive Manufacturing*, 102, 104721. <https://doi.org/10.1016/j.addma.2025.104721>
- Bostan, B., Hinnebusch, S., Anderson, D., & To, A. C. (2025). Accurate detection of local porosity in laser powder bed fusion through deep learning of physics-based in-situ infrared camera signatures. *Additive Manufacturing*, 101, 104701. <https://doi.org/10.1016/j.addma.2025.104701>
- Giri, S., Liu, S., Gorgannejad, S., Thampy, V., Quan, P., Nicolino, J. W., Strantz, M., Forien, J.-B., Martin, A. A., Calta, N. P., & Tassone, C. J. (2026). In-situ sensor monitoring of multi-class gas porosity formation in laser powder bed fusion using convolutional neural network. *Journal of Intelligent Manufacturing*. <https://doi.org/10.1007/s10845-026-02861-z>

- Zhang, H., Caputo, A. N., Neu, R. W., Vallabh, C. K. P., To, A. C., Alam, M. J., & Zhao, X. (2026). Process-agnostic multi-metric nondestructive characterization of porosity in additive manufacturing via specialized single-camera two-wavelength pyrometry. *Additive Manufacturing*, 127, 105282. <https://doi.org/10.1016/j.addma.2026.105282>
- Tempelman, J. R., Wachtor, A. J., Flynn, E. B., Depond, P. J., Forien, J.-B., Guss, G. M., Calta, N. P., & Matthews, M. J. (2022). Sensor fusion of pyrometry and acoustic measurements for localized keyhole pore identification in laser powder bed fusion. *Journal of Materials Processing Technology*, 308, 117656. <https://doi.org/10.1016/j.jmatprotec.2022.117656>
- Li, Z., Zheng, H., Zhang, Z., Wang, J., Wen, G., Grasso, M., & Colosimo, B. M. (2026). On the use of acoustic emission methods for in-situ monitoring in metal additive manufacturing: a review study. *Additive Manufacturing Frontiers*, 5(2), 200347. <https://doi.org/10.1016/j.amf.2026.200347>
- Brooke, R., Zhang, D., Qiu, D., Gibson, M. A., & Easton, M. (2025). Compositional criteria to predict columnar to equiaxed transitions in metal additive manufacturing. *Nature Communications*, 16, 5710. <https://doi.org/10.1038/s41467-025-60162-0>
- Prabhune, B., Panicker, N., Jordan, B., Lim, B., Snyder, K., Delchini, M., See, N. D., Nag, S., Plotnikov, Y., & Lee, Y. (2025). Multi-physics melt pool modeling and process optimization for laser direct energy deposition of Nb-based refractory C103. *Journal of Manufacturing Processes*, 154, 444-461. <https://doi.org/10.1016/j.jmapro.2025.09.082>
- Jeong, W., Cho, S., & Ryu, H. J. (2025). Optimization and characterization of C103 Nb alloy fabricated by laser wire directed energy deposition. *International Journal of Refractory Metals and Hard Materials*, 133, 107318. <https://doi.org/10.1016/j.ijrmhm.2025.107318>
- Xu, Z. Y., Mao, J. Y., Ren, R. X., Wu, Z. Q., Lei, Y. J., Han, L. L., Chen, C., Fan, W., & Wang, Y. (2026). Research progress and challenges of intelligent in situ monitoring for laser additive manufacturing processes based on machine learning. *Advances in Mechanical Engineering*. <https://doi.org/10.1177/16878132261442327>
- Pak, P., & Barati Farimani, A. (2025). AdditiveLLM: Large Language Models Predict Defects in Metals Additive Manufacturing. *arXiv:2501.17784*. <https://arxiv.org/abs/2501.17784>

第7章 3Dプリンティングされた航空宇宙合金の後加工および高サイクル疲労寿命保証

はじめに

家庭で使う3Dプリンターを思い浮かべてみよう。プラスチックの糸を溶かし、一層ずつ積み上げて物を作る。ロケットエンジンの部品も似た方式で作る。ただし材料がプラスチックではなく金属粉末である。レーザーが金属粉末を一瞬で溶かし、一層ずつ固める。このようにして複雑な形状を丸ごと作り出すことができる。

この方式はロケット部品の製作を大きく変えた。以前は複数の部品を別々に作り、溶接で接合していた。現在では冷却流路が内部に入った部品も一度に作る。部品点数が減り、重量が軽くなる。複数の部品をつなぎ合わせていた工程がなくなることで、製作時間も短縮される。

しかし問題が一つある。プリンターから造形したばかりの金属は、そのままロケットに取り付けることができない。表面が粗く、内部に小さな空孔が残る。目に見えない応力も内部に閉じ込められている。この状態のまま高速回転させると、部品が破損する危険がある。

そのため、造形後の手入れが重要となる。この手入れを後加工という。表面を切削して滑らかに整える。熱と圧力で内部の空孔をなくす。熱処理によって組織を均一にする。本章では、表面の仕上げから内部欠陥の除去に至る後加工のプロセスを順に扱う。

台所で筋張った肉を切る場面を考えてみよう。柔らかい豆腐は包丁が簡単に通る。筋張った肉は包丁の刃がなかなか入らない。ロケット用の超合金は筋張った肉と似ている。削るのが非常に難しい。このように削りにくい性質を難削性という。

もう一つ、さらに大きな懸念がある。それは疲労である。疲労とは、小さな力が何度も繰り返しかかることで材料が破壊される現象である。ペーパークリップを何度も折り曲げたり伸ばしたりすると折れてしまう。一度に大きな力を加えたわけでもないのに折れるのである。ロケットのターボポンプの回転翼がこのような危険にさらされている。

本章では、人工知能が二つの作業をどのように支援するかを見ていく。第一は、削りにくい金属を適切に削る条件を見出すことである。第二は、部品が何回の繰り返し荷重まで耐えられるかを事前に把握することである。どちらの作業も、人間の経験だけでは長い時間を要する。人工知能はデータを学習して答えを素早く絞り込む。

ただし、人工知能がすべてを決定するわけではない。ロケット部品は人命と莫大な費用がかかった製品である。人工知能の予測は実験と検査によって再確認しなければならない。本章では、人工知能と実験が互いに確認し合いながら協調して機能する方法を説明する。

本章を読み終えると、二つのことが見えてくる。一つは、3Dプリンティング金属がなぜ後処理を必要とするのかである。もう一つは、人工知能がその仕上げや検査をどのように支援するのかである。難しい数式は使わない。身近な例を交えながら一つずつ解き明かしていく。ゆっくり読み進めれば、本章の全体像が容易に把握できるはずである。

7.1 3Dプリンティングへ移行するロケット部品と新たな課題

本節で扱う内容をまず整理してみる。ロケットエンジンの心臓部は極めて過酷な場所である。一方には氷点下200度を超える極低温燃料が流れる。もう一方には数百℃を超える高温ガスが通過する。圧力も高く、振動も激しい。このような場所で使用される金属をなぜ3Dプリンティングで作るのか、そしてその際にどのような弱点が生じるのかを本節で考察する。

ロケットエンジンの部品は軽くて頑丈でなければならない。重量が重ければ搭載できる積載物が減る。強度が不足していれば高圧に耐えられない。この二つの要求は互いに相反する。軽量化を図ると脆弱になりやすいた

めである。積層造形（Additive Manufacturing, AM）はこの問題を解決する道を切り開いた。

再生冷却燃焼室が良い例である。燃焼室の壁面は高温の火炎に直接さらされる。そのまま放置すれば壁が溶けてしまう。そのため、壁の内部に細い冷却流路を設ける。冷たい燃料がその流路を通過しながら壁を冷却する。このように流路が壁の内部に隠れた構造は、従来の方法では製作が困難であった。積層造形は、このような複雑な内部構造を一度に作り出す。

部品を製作する代表的な技術がレーザー粉末床溶融結合（Laser Powder Bed Fusion, LPBF）である。薄く敷き詰めた金属粉末の上をレーザーが通過する。レーザーが照射された箇所は瞬時に溶融し、直ちに凝固する。その上に再び粉末を敷き、レーザーを照射する。この工程を数千回繰り返して部品を積み上げていく。

ロケット部品に多用される金属はニッケル基超合金（superalloy）である。超合金は高温下でも強度を失わない特殊金属である。代表的な材料がインコネル718（Inconel 718）である。これに加えてヘインズ（Haynes）系合金も用いられる。これらの金属は高温ガスの中でも長期間耐え抜く。

問題は、レーザーで溶融した金属の内部事情である。レーザーが通過した箇所は極めて急速に冷却される。1秒間に数十万度も温度が下がるほど急速である。このように急冷されると、組織が不均一に凝固する。積層方向に沿って結晶が細長く成長する。この細長い結晶を柱状晶（columnar grain）という。

方向によって性質が異なる現象も生じる。これを異方性（anisotropy）という。木材を思い浮かべるとわかりやすい。木材は木目に沿って割ると簡単に裂ける。木目を横切って切るにはより大きな力が必要となる。積層金属も方向によって強度が異なる。この性質が部品の設計と加工を難しくする。

急速な冷却は別の痕跡も残す。冬場に凍てついたガラスのコップに熱湯を注ぐとひびが入る。内側と外側が異なる速度で膨張するためである。積層金属の内部でも似たようなことが起きる。凝固する速度が場所によって異なる。その結果、部品の内部に応力が閉じ込められる。この閉じ込められた力を残留応力（residual stress）という。

これに加えて成分の偏析も生じる。溶融した金属が凝固する際、特定の元素が局所的に偏る。インコネル718ではニオブ（Nb）元素が偏析する。その箇所に硬い粒子が形成される。この粒子をLaves相（Laves phase）と呼ぶ。Laves相は母相金属よりもはるかに硬く、脆い性質を持つ。

このような内部の事情から、二つの課題が生じる。第一に、削るのが難しいという点である。硬い粒子が切削工具を摩耗・損傷させる。第二に、内部の空孔が疲労亀裂の起点になるという点である。高速回転する部品において、この起点は危険である。そのため、後続の節でこれら二つの課題を順に扱っていく。

積層造形がロケット産業において急速に定着したのには理由がある。部品を一つ製作する時間が大幅に短縮されるためである。以前は鋳型の製作だけで数か月を要した。積層造形は型を必要とせず、直接部品を造形する。設計を変更すれば、翌日には新しい部品を造形できる。このように設計と製作を短いサイクルで反復できるため、開発速度が飛躍的に向上する。

軽量化の効果も大きい。複数の部品を一つに統合すれば継ぎ目がなくなる。継ぎ目は重量を増大させ、脆弱部になりやすい。継ぎ目をなくすことで軽量かつ高強度になる。そのため、ロケット各社はこの技術に多額の投資を行っている。アメリカ航空宇宙局も積層燃焼室を長年試験してきた。

後処理には熱処理が不可欠である。熱処理とは金属を加熱・冷却して組織を変化させる処理である。まず高温に加熱して硬い粒子を母相中に再固溶させる。この段階を溶体化という。次に適切な温度で長時間保持し、強化粒子を均一に成長させる。この段階を時効という。これら二つの段階を経て初めて、超合金はその本来の強度を発揮する。

要約すると、積層造形は大きな利点と新たな課題を同時にもたらした。利点は複雑な形状の実現と迅速な製作である。課題は粗い表面と内部欠陥である。この課題を解決する鍵となるのが後加工と検査である。そして、その一連の後加工および検査プロセス全体を人工知能が傍らで支援する。

7.2 積層造形された超合金が削りにくい理由

本節で扱う内容をまず整理してみよう。難削性とは削りにくい性質を指す。積層造形された超合金は、もともと削りにくい金属をさらに削りにくくしている。なぜそうなのか、三つの理由に分けて考察する。結晶組織の方向性、閉じ込められた応力と加工硬化、そして工具が摩耗するプロセスである。

7.2.1 方向によって異なる結晶組織

本小節では、結晶組織の方向性が切削に与える影響を扱う。前述の通り、柱状晶は積層方向に沿って長く成長する。この組織がなぜ削ることを難しくするのかを詳細に見ていく。さらに、硬いLaves相が工具に与える衝撃についても考察する。

金属は微小な結晶が集まって構成されている。結晶の一つひとつには原子が規則正しく配列している。この結晶がどの方向を向いているかによって性質が左右される。積層金属では結晶が一方向に偏っている。積層方向に沿って結晶が細長く成長するため、方向ごとに性質が異なるのである。

切削工具がこの組織を通過する際、受ける抵抗が変化する。結晶の方向と刃物の方向が交わる角度が位置によって異なる。ある場所では滑らかに削れるが、別の場所では強く抵抗する。そのため、切削抵抗が周期的に変動する。力が不均一になるため加工が不安定化し、表面も不均一になってしまう。

この変動は工具に繰り返しの衝撃を与える。衝撃が蓄積すると刃先が少しずつ損傷する。振動も増大する。この振動をチャター（chatter）という。チャターが激しくなると表面に波状の模様が残る。精密部品において、このような模様は重大な欠陥となる。

ここに硬い粒子が加わることで問題が深刻化する。インコネル718が凝固する際、ニオブが結晶粒界に偏析する。その場所に板状または塊状のLaves相が生じる。この粒子は母相金属よりもはるかに硬く、同時に脆い性質を併せ持つ。

切削工具がこの硬い粒子と衝突するとどうなるだろうか。柔らかい土に混ざった砂利を刃物で切るようなものである。刃先に微小な刃こぼれが生じる。このような微細な破損が蓄積し続けると、最終的に工具の刃先が丸く摩耗してしまう。

この問題を解決するには、まず組織を均一に整えなければならない。後述する熱処理がその役割を果たす。熱処理は硬い粒子を溶かして母相中へと戻す。細長い柱状晶もより丸みを帯びた形状へと変化させる。そうすることで、方向によって性質が異なる度合いが低減される。

このような組織の差異は部品の性能に直結する。方向によって強度が異なれば設計が困難になる。強度が低い方向を避けて部品を配置しなければならない。組織を均一に整えれば、このような懸念が軽減される。したがって後処理は、加工性だけでなく性能も向上させる。

人工知能はこの組織情報を予測に取り入れる。結晶がどの方向を向いているか、硬い粒子がどれだけ存在しているかが入力データとなる。これらの値に応じて切削抵抗がどのように変化するかを学習する。人間が組織写真を一枚一枚目視で確認するのは困難である。人工知能は大量の写真を迅速に読み解き、規則性を見出す。

結晶の方向は特殊な装置で測定する。試料表面に電子ビームを照射すると、結晶ごとに異なる模様が現れる。この模様から各結晶がどちらを向いているかがわかる。この方向情報が人工知能の優れた入力データとなる。人間が方向を目視で数え上げるのは困難であるが、機械は膨大な結晶の方向を一度に読み取る。

積層の角度も性質を変化させる。部品を立てて積層するか、寝かせて積層するかによって組織が異なる。同じ図面であっても配置する方向が異なれば強度が異なる。そのため設計段階から積層方向を決定する。この角度も加工性や疲労に影響を及ぼす。人工知能は角度を変数として組み込み、その影響を学習する。

ただし、組織は部品ごとにわずかに異なる。同じ設定で製造しても、位置によってばらつきがある。レーザーのわずかな揺らぎや粉末の粒径の違いがばらつきを生み出す。そのため、モデルの予測にも揺らぎが残る。この揺らぎをどのように扱うかについては、後続の節で詳細に見ていく。

7.2.2 閉じ込められた応力と削るほど硬くなる性質

本小節では、閉じ込められた応力と加工硬化を扱う。前述の通り、積層金属の内部には力が閉じ込められている。この閉じ込められた力が切削時にどのような問題を引き起こすのかを考察する。そして、超合金が切削中にさらに硬くなる性質についても見ていく。

まず、残留応力を改めて整理してみよう。部品の内部には多方向に力が閉じ込められている。この力の集合体をテンソルという数学的な箱で表現する。テンソルとは多方向の数値をまとめて格納する表のようなものと考えればよい。目には見えないが、部品の内部で互いに押し引きし合っている。

この閉じ込められた力は、切削する瞬間に問題を露呈させる。表面を切削すると、その部分の応力が解放される。すると残りの部分がバランスを失う。薄い翼やリング状の部品が歪んでしまう。精密な寸法を合わせようとして、かえって形状が狂ってしまう。そのため、どの面から先に削るかという順序まであらかじめ決めておかなければならない。

次は加工硬化（work hardening）である。加工硬化とは、金属が変形するほどさらに硬くなる性質である。針金を何度も折り曲げると、その部分が硬くなる。超合金はこの性質が強い。刃先の直前にある薄い層が一瞬にしてさらに硬くなる。

すると工具は、硬化したばかりの層を再び削らなければならなくなる。より大きな力が必要になり、発熱も増える。インコネル718は熱を放出しにくい金属である。熱伝導率は通常の鋼の3分の1程度にとどまる。そのため、逃げ切れない熱が刃先と部品の間にこもり、温度をさらに上昇させる。

強化相も工具の負担となる。インコネル718の内部には非常に微小な強化粒子が分散している。本合金の主な強化粒子はニオブを含むガンマダブルプライム（ γ'' , Ni₃Nb）である。この粒子が金属を強固に保つ。高温下でもこの粒子は容易には分解しない。そのため、高温の切削領域でも金属が軟化せず、工具は継続して大きな力を受ける。

これらすべての要因が重なり、表面損傷を引き起こす。切削された表面直下の薄い層に変化が生じる。組織が微細に破碎され、色が白く変化する。この層をホワイト層（white layer）と呼ぶ。ホワイト層には引張残留応力と微小亀裂がともに残りやすい。この層が亀裂の起点となり、部品の疲労寿命を大幅に低下させる。

ホワイト層はなぜ危険なのだろうか。この層には目に見えない引張残留応力が存在する。引張応力は亀裂を開口させる力である。ここに微小亀裂まで重なると、破壊の種となる。繰り返し荷重を受けると、この種から亀裂が成長する。そのため、最終仕上げ加工ではホワイト層を残さないようにしなければならない。

この問題を軽減する方法もある。切削後に表面を微小粒子で叩く後処理を追加する。この処理は表面に圧縮応力を残留させる。圧縮応力は亀裂を押し閉じる力である。引張応力とは反対の方向である。このように表面に圧縮応力を付与すると、部品の疲労寿命が向上する。

人工知能はこれら多様な後処理の効果も同時に学習する。切削条件、ピーニング処理、熱処理をすべて入力として与える。すると、どの組み合わせが良好な結果をもたらすかを予測する。人間が一つひとつ実験していた作業を大幅に削減できる。それでも最終確認は実際の試験によって行う。

人工知能はこのリスクを事前に察知するために用いられる。切削条件と残留応力値を入力すると表面状態を予測する。どのような条件でホワイト層が発生するかを学習する。これにより危険な条件を回避できる。チタン積層部品においては、プロセス条件から表面粗さと硬度を予測するディープラーニングモデルが登場している。超合金の切削表面に対しても同様のアプローチを適用する方向性を本書は提案する。

しかし、予測は学習した範囲内でのみ信頼できる。未知の条件では誤差が大きくなる。そのため、実部品は必ず表面検査で確認する。ホワイト層は薄く、目視では見落としやすいためである。人工知能は危険な条件を事前にスクリーニングし、候補を絞り込む。

7.2.3 工具の摩耗様態と表面損傷

本小見出しでは工具が摩耗する多様なメカニズムを扱う。工具摩耗（tool wear）は生産品質に直結する。工具が摩耗すると表面粗度が増大する。粗い表面は疲労亀裂の起点となる。そのため、工具がどれほど摩耗したか

を事前に把握することが品質管理において重要である。

工具摩耗にはいくつかの種類がある。第一はノッチ摩耗である。切込み深さの境界部において工具に深い溝が形成される。この部位は空気中の酸素と硬化した金属層がともに摺動する場所である。酸素と硬質金属層が相互に擦れ合うことで、この溝が次第に深くなる。

第二は溶着に伴う剥離である。ニッケルは工具材料と凝着しやすい。切削された切りくずが刃先に焼き付く。この塊を構成刃先と呼ぶ。この塊が脱落する際、工具表面のコーティングまで一緒に引き剥がす。その結果、コーティングが剥離して工具表面が急速に損傷する。

第三は拡散摩耗である。切削領域は極めて高温になる。高温下では原子が相互に拡散する。工具内部の原子が切りくず側へと移行する。これにより工具表面に窪んだ痕跡が残る、この窪みをクレータと呼ぶ。

第四は表面ホワイト層と微小亀裂である。前述したホワイト層がここでも現れる。急激な変形と急冷が重なり、薄いホワイト層を形成する。この層には亀裂が潜みやすい。外見上は滑らかに見えても、内部には亀裂のような欠陥が潜んでいる。

これらすべての摩耗は互いに絡み合っている。一方が進行すると他方も連鎖して悪化する。そのため、単一の原因のみに注目してはならない。複数の信号を総合的に観察する必要がある。切削力、振動、音響、温度のすべてが摩耗の兆候となる。

人工知能はこれらの信号を統合して読み取る。センサが切削中の信号をリアルタイムで収集する。モデルはこの信号に基づいて現在の工具摩耗量を推定する。近年の研究では、摩耗した工具の画像をディープラーニングで解析し、摩耗度を即座に予測した。人間が加工を停止して拡大鏡で観察していた作業を機械が代替する。

他の金属材料でも同様のアプローチが通用する。ある研究では、ハステロイC276というニッケル合金を切削する際の工具摩耗をデータ駆動型モデルで予測した。多くの超合金が類似した摩耗挙動を示すためである。このような知見はロケット用超合金にも参考になる。

工具摩耗を予測できれば、無人加工も可能になる。機械が自律的に工具の状態を監視する。危険が生じれば送り速度を落としたり工具を交換したりする。人間が常時見守る必要はない。このように夜間に無人で部品を切削する工場において、予測モデルはその安全性を下支えする。

これら4つの摩耗は温度に大きく左右される。切削領域が高温になるほど摩耗は加速する。したがって冷却が重要となる。切削油剤を供給して冷却を行う。高圧で切削油剤を刃先に直接噴射することもある。この冷却方式も人工知能の入力変数となる。

要約すると、工具摩耗予測は品質管理の目となる。摩耗が深刻化する前に工具を交換できる。不良部品が発生する前に加工条件を補正できる。ただし、センサ信号にはノイズが混入する。振動データには工作機械自体の揺れも含まれる。そのため、モデルはノイズ耐性を持つよう適切に訓練されなければならない。複数のセンサを併用することでノイズの影響を低減できる。

7.3 適切な切削のための切削力計算と後処理最適化

前節では被削性が低い理由を考察した。本節ではその困難をいかに克服するかを検討する。3つのトピックを順に扱う。まず切削にかかる力をどのように計算するかを見る。次に後処理によって被削性がどのように変化するかを検証する。最後に人工知能が最適条件をどのように探索するかを解説する。

7.3.1 切削力とその力を扱うモデル

本小見出しでは切削時に作用する力と、その力を扱うモデルを検討する。切削力（cutting force）とは工具が金属を押す力である。この力を事前に把握できれば、適切な工具と加工条件を選定できる。切削力計算の基本的概念と振動問題を併せて考察する。

切削力は単一方向のみに作用するのではない。前方へ押す力、横へ押す力、下方へ押し付ける力が共存する。そのため切削力は3方向の成分を持つベクトルとして表される。ベクトルは大きさと向きを併せ持つ量である。

これに対し、材料内部に生じる応力はテンソルとして表される。テンソルは複数の方向の値を包括する量である。切削力ベクトルと応力テンソルは互いに異なる量である。この力の大きさは切削厚さと材料の強度に依存する。

切削中には3つの現象が同時に発生する。金属の変形、発熱、そして摩擦である。優れたモデルはこれら3要素を統合して扱わなければならない。材料が急激に変形を受ける際の強度は温度によって変化する。高温になると金属は幾分軟化する。この関係を数式ではなくテーブルデータとしてモデルに組み込む。

このモデルは材料ごとに異なる材料定数を用いる。定数は実験によって決定される。同一のインコネル718であっても、積層材と鍛造材では定数が異なる。積層材は金属組織が異なるためである。したがって積層材専用の実験が必要となる。このような積層材専用の実験データが十分に蓄積されて初めてモデルの精度が高まる。

定数を決定する実験も人工知能が支援する。切削信号から定数を逆算する手法が存在する。力と温度を測定し、その測定値に整合する定数を選定する。人間が手作業でフィッティングしていた作業を機械が高速に実行する。これにより新規材料に対してもモデルを即座に適合させることができる。

振動問題も重要である。前述したびびり振動（チャター）がこれに当たる。びびり振動とは工具と部品が相互に励振し合う振動現象である。一度振動が生じると、次の回転時にその削り痕を再び切削することになる。すると揺れはさらに増幅する。微小な揺れが自己励起的に増大し、加工を阻害する。

この振動を防ぐには、安全な切込み深さを把握する必要がある。深く削りすぎると振動が増大する。浅く削れば振動は収まる。回転速度によってその境界値は変動する。この境界を描いた図を安定性限界線図と呼ぶ。この図を参照して振動の生じない条件を選定する。

人工知能はこの計算を高速化する。物理モデル単体では計算に長時間を要する。条件をわずかに変更するたびに最初から解き直さなければならない。人工知能は物理モデルの計算結果を事前に学習する。その後は新たな条件に対する解を即座に出力する。このように重い計算を代替するモデルをサロゲートモデルと呼ぶ。サロゲートは代理という意味である。厳密な計算は事前に数回のみ行っておく。その結果を学習した代理モデルが以降の予測を担う。

この手法は現場での時間を大幅に短縮する。従来は条件を変更しながら何度も試し削りを行っていた。現在はモデルが危険な条件を事前に選別してくれる。残った少数の条件のみを実際に試験する。ただし、物理モデルが誤っていれば人工知能も誤る。そのため、物理法則とデータを融合して活用するアプローチが安全である。

物理法則とデータを融合する手法を物理情報機械学習（PIML）と呼ぶ。この手法は物理法則を人工知能に組み込む。データが少なくても物理法則が解を拘束する。突飛な予測を防ぐ安全装置となる。この考え方は本書の後続章でも繰り返し登場する。ロケット工学のようにデータが希少な分野において極めて有用である。

7.3.2 鍛造材、積層まま材、HIP処理材の被削性比較

本小見出しでは3つの状態の金属を比較する。同一のインコネル718であっても、製造方法や後処理によって特性が異なる。鍛造材、積層直後の状態、そして熱間等方圧加圧を経た状態を対比して考察する。

まず鍛造材（wrought）を見よう。鍛造材は金属を加圧して成形した素材である。鍛冶屋で鉄を叩いて鍛える手法と本質は同一である。組織が緻密で均一である。結晶粒が微細で丸みを帯びている。そのため切削力の変動が3つの素材の中で小さい部類に入る。工具摩耗もそれだけ少なく、予測が一段と容易である。

次は積層直後の状態である。この状態をアズビルト（as-built）とも呼ぶ。後処理を施さずプリンタから造形したままの状態である。残留応力が大きく、硬質なLaves相が偏析している。柱状晶も太く長い。そのため切削抵抗が鍛造材より大幅に増大する。工具が破損するリスクも3つの素材の中で高い部類に入る。

3つ目は熱間等方圧加圧（Hot Isostatic Pressing, HIP）を経た状態である。HIPは高温と高圧を同時に加える後処理である。通常は摂氏1000度を超える温度で実施される。圧力も100メガパスカルを超える。この条件下で金属内部の空孔が押し潰されて閉塞する。

パン生地を連想すると分かりやすい。生地の内には細かな気泡が含まれている。長く捏ねて圧力を加えると気泡が抜け、生地が緻密になる。HIPもこれに似ている。高い圧力が金属内部の空孔を押し潰して圧着させる。高圧と熱が原子を移動させ、空孔の壁面同士を密着・接合させる。

HIPは組織も変化させる。ただしその度合いは温度と保持時間に依存する。温度が十分に高ければ、硬質なLaves相が母相中へ固溶する。温度が低いか時間が短いと、Laves相が一部残留する。細長い柱状晶も条件によってはそのまま残る。組織が均一に変化すると、方向による差異や切削力の変動が低減する。そのためHIPは溶体化処理や時効処理、均質化熱処理と条件を整合させて併用される。

ただしHIPにも限界がある。すべての空孔を除去できるわけではない。表面に連通した空孔と内部に孤立した空孔は挙動が異なる。積層中に閉じ込められたアルゴン気泡は、HIPで閉塞しても再び問題を引き起こす。アルゴンは金属に溶けない気体であるためである。後に再び高温に晒されると、閉塞していた気泡が膨張して開口する。この現象を熱誘起気孔（熱誘起ポロシティ）と呼ぶ。そのため、最初からガス気泡を低減することが重要である。

HIP後に新たな問題も生じる。組織が軟質化すると、切りくずが分断されにくくなる。切りくずが長く連続して工具に巻き付く。この巻き付きが深刻化すると表面を傷つける。そのため、切りくずを良好に分断できるよう工具形状を選定しなければならない。

人工知能はこの比較をデータとして整理する。各状態の切削データを集めて差異を学習する。そうすることで、新しい部品がどの状態に近いかを判断する。どのような後処理を経るべきかも提案する。最近の研究では、HIPと熱処理を併せて最適化する方法が広く検討されている。

HIPはコストと時間がかかる後処理である。大型装置の中で長時間加熱し、加圧しなければならない。そのため、すべての部品に適用することは難しい。どの部品にHIPがどうしても必要なかを判断しなければならない。人工知能はこの判断も支援する。欠陥情報を見てHIPの効果をあらかじめ見積もる。

公開された研究も優れた指針となる。アメリカ航空宇宙局は、HIPが積層インコネル718の欠陥をどのように低減するかをシミュレーションで調べた。ある研究では、初期気孔が多い部品をHIPで処理した後に疲労強度を測定した。大部分の気孔は閉塞したが、アルゴン気泡は残存した。こうした結果が蓄積され、後処理設計の基礎となる。

鍛造材を基準とするのには理由がある。鍛造材は長期間にわたり検証されてきた素材である。性質がよく知られており、データも豊富である。積層材を鍛造材のレベルにまで引き上げることが目標である。後処理はその目標に近づくための道である。人工知能はその道をより迅速に見つけられるよう支援する。

7.3.3 少ない実験で良好な切削条件を見出す

本項では、少ない実験で良好な条件を見出す方法を扱う。切削条件は多岐にわたる。速度、送り量、切り込み深さ、冷却方式がすべて変数となる。これらの変数をすべて組み合わせると、実験数が爆発的に増大する。田口実験計画法と人工ニューラルネットワークを組み合わせるとこの問題を解決する。

田口実験計画法（Taguchi method）は、少ない実験で多くの条件を比較する方法である。すべての組み合わせを試すことはしない。代表となる組み合わせのみを選定して実験を行う。適切に選ばれたいくつかの組み合わせだけで全体の傾向を把握する。実験回数が減るため、その分時間とコストも削減できる。

この方法により実験数を大幅に削減する。例えば、数百通りの組み合わせを18回の実験に減らすことができる。各実験において表面粗さと工具摩耗を測定する。切削に要したエネルギーも測定する。このように多様な組み合わせから集めた値が、人工知能の学習データとなる。

人工ニューラルネットワーク（Artificial Neural Network, ANN）はこのデータから規則を学習する。人工ニューラルネットワークは人間の脳の神経結合を模した計算構造である。入力には切削条件と熱処理状態が入る。出力には表面粗さと工具摩耗が得られる。モデルは入力と出力の間の関係を自ら見出し、規則として習得する。

学習を終えると、実験していない条件についても予測する。新たな速度や新たな送り量を入力すれば、結果をあらかじめ示してくれる。その上で、最適条件を探索する処理を適用する。表面は滑らかに、工具摩耗は少なく抑える条件を選択する。二つの目標が相反する場合には、そのバランス点を見出す。

実際の事例も蓄積されている。ある研究では、積層インコネル718の微細旋削加工を扱った。熱処理を経た素材の被削性がどのように変化するかを調べた。毎分30メートルから60メートルの間の切削速度を比較した。こうしたデータが集まり、モデルの学習材料となる。

この組み合わせは現場での実用性が極めて高い。まず小さな実験計画表を作成する。次にセンサーや計測によってデータを収集する。最後に人工知能が条件と品質の関係を学習する。こうすることで、新しい部品の加工条件を迅速に決定できる。

目標が複数ある場合にはバランス点を見出さなければならない。表面は滑らかに、工具摩耗は少なく、加工時間は短くしたい。これらの目標は互いに相反する。高速で切削すれば表面粗さが悪化しやすい。そのため、いずれか一つだけを改善しようとするとは他方が悪化してしまう。

そこで、複数の目標を同時に扱う手法を用いる。一方をわずかに譲歩することで他方を得る。こうして得られた良好な組み合わせを収集する。その中から部品に適した組み合わせを選択する。人工知能はこれらの組み合わせを迅速に見つけ出してくれる。

実際の目標は表面粗さを小さく抑えることである。ロケット部品は表面が滑らかであってこそ疲労に強い。適切に選定した切削条件と優れた工具を併用すれば、この目標に近づくことができる。滑らかな表面は亀裂の起点を減らす。したがって、表面仕上げは疲労保証の第一歩となる。

限界も明確である。モデルは学習した範囲内でのみ信頼できる。学習に含まれていなかった速度や送り量に対しては予測の精度が低下する。データが少なければ誤差は大きくなる。そのため、重要部品については実際の切削試験によって条件を確認する。予測が正しかったかどうかを表面粗さと工具摩耗で検証する。

工具の選定も重要な変数である。超合金には特殊コーティングを施した工具を使用する。コーティングは熱と摩耗に耐えるのを助ける。セラミックス材料で作られた工具を用いることもある。どの工具がどのような条件に適しているかも人工知能が学習する。そうすることで、工具コストと加工品質の双方を最適化できる。

今後の課題はデータを拡充することである。複数の機関の実験データを集めれば、モデルはより頑健になる。ただし、機関ごとに測定方法が少しずつ異なる。切削条件の記載方式もまちまちである。そのため、データを統一するための規則が必要となる。こうした標準が整えば、予測の信頼性は向上する。

7.4 ターボポンプ翼の超高サイクル疲労破壊

これまでは、いかに良好に切削加工するかを扱ってきた。本節からは、部品がどれだけ長期間耐えられるかを扱う。ロケットのターボポンプにおける回転翼がなぜ特に危険なのか、そしてその部品が破壊される際にどのような痕跡を残すのかを考察する。

7.4.1 極低温と高温が併存する過酷な環境

本項では、ターボポンプの翼が置かれた過酷な環境を扱う。ターボポンプ (turbopump) は燃料と酸化剤を高压で送り込むポンプである。その内部で高速回転する羽根車をインペラ (impeller) と呼ぶ。この部品が受ける荷重がなぜ特異であるかを見ていく。

インペラは極めて高速で回転する。毎分3万回転から8万回転に達する。自動車エンジンの10倍以上も速い速度である。回転中、遠心力が翼を外側へ引っ張る。この遠心力は、回転が一定であれば大きさがほとんど変化しない定常荷重である。

温度環境も過酷である。インペラ自体は極低温の推進剤と直接接触する。液体水素はマイナス250度を下回る極低温であり、液体酸素もマイナス180度前後である。高温の作動ガスはインペラではなく、同一軸上に連結されたタービン側にある。この熱はシャフト、ベアリング、シールを伝わってポンプ側へと徐々に伝達される

。そのため、一本のシャフトの両端が、極めて冷たい環境と高温の環境とに同時に直面することになる。

大きな温度差は収縮と膨張を引き起こす。冷たい側は収縮し、熱い側は膨張する。この差が部品内部に応力を生み出す。ここに定常的な遠心力が基底荷重として加わる。さらにその上に、繰り返される振動荷重が重なって部品を揺さぶる。

繰り返し荷重は様々な要因から発生する。翼が固定構造物の側を通過するたびに応力が加わる。回転軸の微小な不釣り合いや圧力脈動も荷重を付加する。始動と停止も一度に大きな荷重を与える。翼通過周波数による荷重は1秒間に数千回も繰り返される。そのため、負荷サイクル数が極めて急速に蓄積される。

このように繰り返し回数が極めて膨大な疲労を超高サイクル疲労（Very High Cycle Fatigue, VHCF）と呼ぶ。通常の設計では1千万回を基準とする。実際の部品が何回まで繰り返し荷重を受けるかは、加振周波数と累積運転時間を掛け合わせることで算出される。試験片による研究では1億回、10億回の領域まで扱う。この領域では疲労の規則が変化するため、個別に検討しなければならない。

通常の疲労試験ではこの領域を扱うことが難しい。10億回を一般的な速度で試験すると膨大な時間がかかるためである。そこで、特殊な高周波疲労試験機を用いる。この試験機は試験片を1秒間に約2万回振動させる。これほど高速な振動を用いても、1回の試験を完了するのに数日を要する。

試験に長時間を要するため、データは極めて貴重である。データが少なければ予測精度が不安定になる。そのため、人工知能がデータを効率的に活用する手法が必要となる。少量のデータであっても信頼性の高い予測を出力しなければならない。データを節約して活用するこの問題については、後の節で改めて詳しく扱う。

材料の選定もこの環境と密接に関わっている。ある種の金属は極低温下で脆化し、破壊されやすくなる。インコネル718は極低温でも機械的性質が比較的安定している。そのため、極低温部品に広く使用されている。ヘインズ系合金はより高温で優れた強度を発揮する。部品が配置される部位に応じて材料を選定しなければならない。

一つの部品内部であっても部位ごとに条件が異なる。翼根部は大きな応力を受ける。翼端部は大きな振動を受ける。そのため、応力に耐えがたい脆弱な部位をあらかじめ特定しなければならない。この部位を危険断面と呼ぶ。疲労保証はこの危険断面を基準にして行われる。

危険断面を特定するためにも計算が必要である。部品に加わる応力をコンピュータで解析する。この計算を有限要素解析と呼ぶ。部品を微小な要素に分割し、応力を一つひとつ算出する。応力が著しく集中する部位が危険断面である。人工知能はこの計算を高速に代替することもある。

インペラの振動には特別な規則が存在する。翼が固定構造物の側を通過する頻度が定まっている。この回数と回転速度が掛け合わされて振動の周期となる。特定の回転速度においては、この振動が部品固有の振動と重なり合う。すると振動が著しく増幅される。この現象を共振と呼ぶ。共振は部品を急速に破損させる。そのため、危険な回転速度を回避するように設計する。

インペラの疲労保証はロケットの安全性における核心である。翼が一枚でも破損すればポンプ全体が破壊される。そうなればエンジンが停止するか、あるいは爆発に至る。そのため、この部品はどの部品よりも厳格な検査を受ける。表面品質と内部欠陥の双方を管理しなければならない。

7.4.2 内部から始まる破壊と魚眼状模様

本項では、超高サイクル疲労がどのように部品を破壊に至らしめるかを扱う。先述のように、この領域では規則が異なると述べた。具体的にどのように異なるのかを見ていく。そして破断面に残される特異な模様についても考察する。

通常の疲労破壊は表面から始まる。表面は傷がつきやすい部位である。繰り返し荷重を受けると、表面にすべり痕が生じる。その痕跡から亀裂が発生する。そのため、表面を滑らかに仕上げることで寿命が延びる。

超高サイクル疲労は異なる。亀裂が表面ではなく内部から発生する。繰り返し回数が極めて膨大になると、加わる応力が小さくても内部の欠陥が耐えきれなくなる。内部に存在する微小な空孔や硬質な粒子が起点となる

。HIPでも除去できなかった微細なアルゴン気泡がその危険な一例である。

亀裂の起点の周囲には特異な領域が形成される。起点周辺において数億回に及ぶ微小変形が蓄積される。内部から発生した亀裂は空気に触れない環境下で進展する。狭い隙間の両面が互いに擦れ合い、組織を極めて微細に破碎する。このように微細に破碎された領域を微細粒領域（Fine Granular Area, FGA）と呼ぶ。この領域は顕微鏡で観察すると周囲よりも暗く見える。魚眼状模様の中心部にこの暗い領域が位置する。

この暗い領域が形成されるまでには長い時間を要する。全疲労寿命の大部分がこの段階で消費される。亀裂が目に見えるほどに成長するまでの期間が長い。外見上は何の問題もなく見えても、内部ではすでに損傷が進行している。

この点は検査時期を設定する上で大きな意味を持つ。損傷は表面には遅れて現れる。そのため、外見だけを見て安心することは禁物である。定められた周期で内部を検査しなければならない。再使用型ロケットにおいては、この周期管理がさらに重要となる。一度使用した部品を再使用する前に、内部の状態を確認しなければならない。

起点から亀裂が進展すると円形の模様が残る。この模様が魚の目のように見えることから、魚眼状模様（fish-eye）と呼ばれる。魚眼状模様は亀裂が内部から発生した証拠である。破断面を観察すれば、この模様によって破損原因を特定できる。

最終的には亀裂が表面に達する。その瞬間、部品は突発的に破壊される。ゆっくりと進展していた亀裂が一気に破断に至る。このように事前に察知しにくい突発的な破壊が何よりも危険である。

このような破壊形態は検査に対して重大な示唆を与える。表面だけを見ては危険を見落とす。内部を検査しなければならない。そのため、X線CT（X-ray CT）と超音波探傷検査を併用する。これらの検査は部品を破壊することなく内部を観察する。このような検査を非破壊検査（non-destructive testing）と呼ぶ。

人工知能はこの検査手法と連携する。CTによって検出された内部欠陥の大きさや位置を入力値とする。この値をもとに疲労寿命を予測する。どの欠陥が危険であるかの優先順位を付ける。最近の研究では、積層部品の危険な欠陥を非破壊で特定する手法が提案されている。人間が見落としやすい内部欠陥を、機械が先んじて特定する。

内部欠陥を完全に除去することは困難である。そのため、欠陥が存在していても安全を維持できるように設計する。この考え方を損傷許容設計（欠陥許容設計）と呼ぶ。どの程度の大きさの欠陥まで耐えられるかをあらかじめ規定する。それ以上の大きさの欠陥を有する部品は廃棄する。人工知能はこうした基準を設定するためのデータを作成する。

この方式は検査基準ともつながる。検査装置は極めて微小な欠陥までは検出できない。検出可能な欠陥には寸法の限界が定められている。設計はこの限界を超える欠陥に対しても安全であるようになされる。そうすれば検査で見逃された欠陥も危険ではない。このように検査と設計が互いの隙間を埋め合いながら安全を守る。

7.5 ばらつきを併せて予測する疲労信頼性保証

疲労寿命は単一の数値として一意には定まらない。同一条件の部品であっても寿命はまちまちである。そのため、予測にはばらつきの幅を併せて含めなければならない。本節では、そのばらつきを扱う人工知能について説明する。欠陥を数値に変換する方法、ばらつきを内包するモデル、そして安全基準へとつなげる方法を見ていく。

7.5.1 材料状態を数値に変換する

本小見出しでは、材料状態を数値に変換する方法を扱う。人工知能は数値を入力として学習する。そのため、欠陥や表面を数値に変換しなければならない。この数値を記述子（descriptor）と呼ぶ。ここでは、どのような数値が疲労寿命にとって重要であるかを一つずつ見ていく。

まず欠陥の形状を数値として表現する。CTで部品内部を撮影すると、空孔の3次元形状が得られる。この形状をテンソルとして整理する。前述のとおり、テンソルは多方向の値を格納する入れ物である。空孔がどの方向に細長いか、どの程度扁平であるかが格納される。

X線CTは病院のCTと原理が同じである。多方向からX線を照射して内部を観察する。その情報を集めて3次元画像を生成する。部品を切断することなく内部の空孔を観察する。空孔の寸法や形状を一つひとつ測定する。このようにして集めた寸法と形状の情報が、疲労予測の基礎データとなる。

欠陥の寸法も重要である。寸法を測定する優れた手法として、村上（Murakami）のルートエリア（square root of area）法がある。この手法は欠陥を微小なき裂のように見なす。欠陥を荷重方向に垂直な面に投影してその面積を測定する。その面積の平方根を欠陥寸法とする。この平方根がき裂を開口させる応力の強さと良好に対応するためである。そのため、複雑な3次元の空孔をこの一つの値に変換して扱う。この値が大きいほど、疲労に対してより悪影響を及ぼす。

欠陥の位置も併せて考慮する。同一の寸法であっても、表面近傍の欠陥のほうがより危険である。表面欠陥は周囲で拘束する材料が少なく、応力がより集中する。空気に触れる環境効果もき裂を幾分早く進展させる。内部深くに存在する欠陥は四方を材料に囲まれているため危険性が低い。そのため、位置に応じて補正値を異ならせて付与する。

表面粗さも数値に変換する。加工された表面には微細な谷と山が存在する。谷が深く鋭利であるほど応力が集中する。この集中の度合いを応力集中係数（stress concentration factor）という。紙を切るときにわずかに切れ目を入れると破れやすくなるのと同じである。小さな傷が分散していた力を一点に集中させ、その部位を弱くするためである。

これらの数値が集まることで疲労寿命へと結びつく。応力の大きさと繰返し回数の関係を描いた図がある。この図をS-N曲線と呼ぶ。欠陥や粗さの情報がこの曲線を上下に移動させる。欠陥が大きく表面が粗い場合、曲線は下方にシフトする。曲線が下に下がるということは、同一の力であっても部品がより早期に破壊することを意味する。

最近の研究では、これらの記述子を人工知能に入力して成果を挙げている。ある研究では、CTで測定した欠陥情報を用いて積層造形金属の疲労寿命を予測した。村上法を多様な積層造形の事例に適用した研究も増加している。欠陥の寸法、位置、形状が寿命に大きな影響を与えるという点が重ねて確認されている。

記述子には材料の硬さ（硬度）も組み入れる。硬度は材料がどれほど硬いかを示す。村上式では、硬度が高いほど欠陥に耐えやすい方向として組み込まれる。しかし、硬度のみで欠陥に対する耐性をすべて説明できるわけではない。極めて硬い材料は、かえって欠陥に対してより敏感になることもある。そのため、硬度とともに欠陥寸法、位置、荷重比を併せて考慮しなければならない。

荷重条件も数値として入力する。力がどれほど大きい、どの方向であるかが重要である。力が一方向のみから作用するのか、多方向に複合して作用するのかによっても異なる。温度も併せて入力する。高温環境と低温環境では材料の性質が異なるためである。

最近の研究では、このような記述子を用いて優れた成果を挙げている。ある研究では、積層インコネル718の高サイクル疲労寿命を予測した。欠陥寸法と荷重の大きさを入力とした。データが不足する問題は、人工知能によってデータを拡張して解決した。その結果、予測の決定係数は0.975まで向上した。平均誤差は1.13パーセントにとどまった。決定係数は予測が実際とどれほど一致しているかを示す値である。この値は1に近いほど予測が実際とよく合致していることを意味する。ただし、この数値はある材料の限られたデータから得られた値である。拡張されたデータから得られた結果であるため、他のプロセスや材料にそのまま適用することは難しい。

ただし、記述子を決定する作業は容易ではない。どの数値を組み入れ、どの数値を除外すべきかの判断が必要となる。重要な数値を欠落させると予測が狂う。不要な数値を組み入れると学習の精度が鈍る。そのため、材料を熟知した専門家と人工知能が協調して選定しなければならない。

7.5.2 解の幅を出力するベイズニューラルネットワーク (BNN)

本小見出しでは、ばらつきを内包する人工知能を扱う。通常のニューラルネットワークは単一の解のみを出力する。疲労予測においてはそれだけでは不十分である。同一条件であっても寿命が広範囲に分布するためである。そのため、解の範囲を併せて出力するモデルが必要となる。

このようなモデルをベイズニューラルネットワーク (Bayesian Neural Network, BNN) と呼ぶ。通常のニューラルネットワークは内部の値が単一の値として確定される。ベイズニューラルネットワークは内部の値を確率分布として扱う。単一の値ではなく値の幅を持つ。そのため、予測出力も一つではなく幅として得られる。

ここで「ガウス (Gaussian)」という言葉が頻繁に登場する。ガウスは釣鐘型の分布を意味する。中央が高く両脇に向かって低くなる形状である。試験の点数の分布を思い浮かべると理解しやすい。平均の周辺に人が多く、両端にいくほど少なくなる。ただし、疲労寿命そのものは釣鐘型ではない場合が多い。対数正規分布やワイブル分布といった別の形状でばらつく。そのため、寿命の対数をとった値に対して釣鐘型の仮定を適用する。この釣鐘型の仮定は計算を簡素化するための便宜的な手法でもある。

この分布においては二つの値が重要である。一つは平均である。平均は代表となる値である。もう一つは広がりである。幅が広いということはばらつきが大きいことを意味する。ベイズニューラルネットワークはこれら二つの値を併せて出力する。

予測がなぜ幅を持つのかを天気予報に例えてみよう。予報は明日の降水確率を70パーセントと伝える。100パーセントと言い切ることはしない。未来のことにはばらつきが存在するためである。ベイズニューラルネットワークも単一の確定値の代わりに確率の幅を併せて提示する。

このモデルを学習させる手法も独特である。内部の値が分布であるため計算が複雑になる。厳密な計算は事実上不可能である。そのため、近似的な分布で代替する手法を用いる。このように近似分布に置き換えて計算量を削減するプロセスが学習の要となる。

学習を終えると、予測を複数回サンプリングする。内部の値が分布であるため、サンプリングするたびに少しずつ異なる解が得られる。これらの解を集めて平均と幅を求める。解同士が互いに近ければ幅は狭くなる。解が分散していれば幅は広くなる。この幅の大きさが、予測をどれほど信頼できるかを示している。

この方式は人間の判断と似ている。経験豊富な技術者も確信と推測を区別する。熟知している部品については自信を持って語る。初めて目にする部品については慎重に語る。ベイズニューラルネットワークもこのように自らの確信度を併せて伝える。そのため、人間はその確信の度合いを確認したうえで結果を信頼して活用しやすい。

このアプローチにはもう一つの利点がある。モデルが未学習の条件に遭遇すると、出力の幅を広く提示する。よく分からないという信号を自ら発信するのである。人間はこの信号を見て注意を払う。幅が広い予測に対してはさらに検証を重ねてから適用する。モデルが自らの限界を知らせることは、安全性の確保に大きく貢献する。

このアプローチは疲労予測に極めて適している。疲労はばらつきが大きい現象である。単一の数値よりも幅を持たせるほうがより実態に即している。近年の多くの研究がこの方向性に従っている。航空用金属の疲労寿命をばらつきとともに予測した研究が報告されている。物理法則を組み込むことで信頼性を高めた研究もある。

物理法則を組み込むと何が良いのだろうか。疲労には長年蓄積された理論が存在する。応力と寿命の関係を表す計算式群である。これらの式を人工知能に併せて組み入れる。そうすればデータが少なくても解が大きく乖離することはない。多軸荷重を併せて扱う研究も登場している。このような潮流が、ロケット部品の寿命保証をより強固なものにする。

この手法にもコストが伴う。解を複数回サンプリングしなければならないため、計算量が増加する。通常のニューラルネットワークよりも学習が難解である。それでもロケット部品にとっては、このコストをかける価値が十分にある。ばらつきを把握することが安全を守ることにつながるためである。単一の数値のみを過信して事故が発生すれば、被害ははるかに甚大となる。

7.5.3 ばらつきを分類して安全基準へ結びつける

本小見出しでは、ばらつきを分類して捉える方法を扱う。前述のとおり、予測は幅を持つと述べた。この幅は一種類ではない。二種類のばらつきが混在している。この二つを分離することで、次に何をすべきかが見えてくる。

第一に、認識的不確実性（epistemic uncertainty）である。これはモデルの知識不足によって生じるばらつきである。データが不足している条件において顕著に現れる。学習したことのない状況に対しては、モデルは確信を持てなくなる。このばらつきは、不足しているデータをさらに補完することで次第に低減する。

第二に、偶然的な不確実性（aleatoric uncertainty）である。これは材料や荷重そのものが本質的にばらつくことによって生じる。同一条件の部品であっても内部欠陥はまちまちである。測定にもノイズが混入する。このばらつきは現象そのものに内在しているため、データを増やしても容易には低減しない。

この二つを分離することがなぜ重要なのだろうか。対処法が異なるためである。認識的ばらつきが大きい場合は、実験を追加してデータを補う必要がある。偶然的ばらつきが大きい場合は、安全余裕をより多く確保しなければならない。二つを一括りにしてしまうと、誤った対策を講じやすくなる。二つのばらつきを切り分けて把握することで、次に何をすべきかが明確になる。

次に、予測を安全基準へと結びつける。ロケット部品は定められた安全基準を満たさなければならない。この基準には二つの要素が同時に組み込まれる。一つは部品の何パーセントが生残するかである。もう一つはその数値をどれほど信頼できるかである。例えば、90パーセントが生残し、それを95パーセントの信頼度で保証する下限を設定する。このように生残率と信頼水準を併せて定めた値を材料許容値と呼ぶ。航空材料で用いられるA基準値やB基準値がその典型例である。平均からばらつきの分を差し引くだけでは、この値を保証することはできない。試験データの数と散らばりを考慮に入れ、統計的に算出する。

この下限を設計許容値と呼ぶ。部品はこの許容値よりも長く耐えなければならない。ここに安全係数をさらに乗じることもある。安全係数は不測の事態に備えた余裕である。このように多重の余裕を設けることで事故を防ぐ。過度な余裕は部品の重量増加を招くため、適切なバランスを追求する。

このようにすれば、安全側の判断を下すことができる。モデルが確信を持てない条件においては寿命を低めに見積もる。確信のある条件においてはもう少し余裕を持たせる。この姿勢こそがロケット部品に相応しい。多少保守的に設定してでも事故を未然に防ぐほうが賢明である。

人工知能のみで認証が完結するわけではない。疲労保証には多様なツールが総合的に用いられる。人工知能による予測、標準疲労試験、非破壊検査、安全係数がすべて不可欠である。標準試験方法も規定されている。荷重の付加方式やデータの解析手法には国際規格が存在する。

人工知能の役割は明確である。危険な候補を迅速に特定する。どの部位を追加で試験すべきかを教える。少ない実験回数で多くの情報を得る手助けをする。人間はその情報をもとに試験計画を精緻に策定し、時間とコストを大幅に削減する。

最終的な判定は人間と実験が下す。人工知能の予測は始まりにすぎず、終わりではない。実際の試験データが予測を裏付けなければならない。品質文書がそのプロセスを記録しなければならない。これらすべてが整って初めて、部品がロケットに搭載される。

今後に残された課題もある。疲労データはいまだ不足している。超高サイクル領域のデータはさらに少ない。試験に長時間を要するためである。そのため、少量のデータから学習する手法が継続的に研究されている。他の材料のデータを転用する手法もある。これらの手法が発展すれば、予測はより堅牢なものとなる。

データの品質も重要である。欠陥をどのように測定したかがデータごとに異なる。試験をどのように実施したかもまちまちである。記録が不十分であれば、モデルは誤った学習をしてしまう。そのため、データを綿密に記録する文化が必要とされる。適切に記録された良質なデータがあってこそ、優れたモデルが生み出される。

規格と認証も共に発展しなければならない。現在の認証規則は従来の材料を基準に作られた。積層材料は性質が異なる。そのため新しい規則が必要である。人工知能の予測を認証にどう組み込むかも議論中である。この議論が整理されれば、積層部品はより広く使われる。

まとめ

本章では2つの大きな問題を扱った。1つは削りにくい金属を上手に切削することである。もう1つは部品がどれだけ長く耐えられるかを知ることである。2つの問題はどちらも3Dプリンティングで作られたロケット部品で生じる。そして2つの問題のどちらにも人工知能が大きな助けとなる。

2つの問題は実は1つにつながっている。上手に切削してこそ表面が滑らかになる。滑らかな表面は疲労に強い。内部の空孔をなくしてこそ亀裂の種が減る。結局、優れた加工が長寿命へとつながる。そのため加工と疲労は常に共に見なければならない。本章は加工と疲労という2つの問題を1つの場に置き、共に扱った。

前半では、なぜ積層超合金が削りにくいのかを調べた。急冷された組織は方向によって性質が異なる。内部には力が閉じ込められており、硬い粒子が集まっている。この性質が工具を早く摩耗させ、表面に白層や微小亀裂も残す。

この困難を克服する道も見た。切削力と振動をあらかじめ計算し、安全な条件を選ぶ。熱間等方加圧で内部の空孔を減らし、組織を均一にする。田口メソッドと人工ニューラルネットワークにより、少ない実験から良好な条件を見出す。人工知能はこのプロセスで候補を素早く絞り込む。

後半では疲労問題を扱った。ロケットターボポンプの羽根は極高サイクル疲労にさらされる。この領域では亀裂が表面ではなく内部から始まる。破断した面には魚眼状（フィッシュアイ）と呼ばれる丸い模様が残る。そのため部品を壊さずに内部を覗き見る非破壊検査が必要である。

疲労予測にはばらつきを共に含めなければならない。同じ条件の部品であっても寿命がまちまちであるためだ。ベイズニューラルネットワークは1つの答えの代わりに答えの幅を出す。この幅を2種類に分ければ、次に行うべきことが見えてくる。データを増やすべきか、安全余裕を増やすべきかを決定できる。

核心は人工知能と人間の協力である。人工知能はデータを素早く読み取ってリスクを指摘する。実験計画を賢く減らしてくれる。しかし最後の認証は実験と検査が担う。ロケット部品はこの2つの力が共に守る。人工知能と実験のこの協力が、安全な飛行を支える基盤となる。

本章の内容を1行に要約してみよう。上手に切削し、上手に仕上げ、上手に検査しなければならない。そしてその結果をばらつきと共に予測しなければならない。人工知能はこれらすべての段階を素早く助ける。人間はその助けを受けて、より安全な部品を作る。3Dプリンティングロケット部品の未来は、最終的にこの協力にかかっている。

関連根拠資料

- Ojo, O. O., & Taban, E. (2023). Post-processing treatments-microstructure-performance interrelationship of metal additive manufactured aerospace alloys: A review. *Materials Science and Technology*, 39(1), 1-41. <https://doi.org/10.1080/02670836.2022.2130530>
- Song, Z., Peng, J., Zhu, L., Deng, C., Zhao, Y., Guo, Q., & Zhu, A. (2025). High-Cycle Fatigue Life Prediction of Additive Manufacturing Inconel 718 Alloy via Machine Learning. *Materials*, 18(11), 2604. <https://doi.org/10.3390/ma18112604>
- Yu, C., Huang, Z., Zhang, Z., Shen, J., Wang, J., & Xu, Z. (2021). Influence of post-processing on very high cycle fatigue resistance of Inconel 718 obtained with laser powder bed fusion. *International Journal of Fatigue*, 153, 106510. <https://doi.org/10.1016/j.ijfatigue.2021.106510>
- ASTM International. (2021). ASTM E466-21: Standard Practice for Conducting Force Controlled Constant Amplitude Axial Fatigue Tests of Metallic Materials. ASTM International, West Conshohocken, PA. <https://www.astm.org/e0466-21.html>
- ASTM International. (2015). ASTM E739-10(2015): Standard Practice for Statistical Analysis of Linear or Linearized Stress-Life and Strain-Life Fatigue Data. ASTM International, West Conshohocken, PA. <https://www.astm.org/e0739-10r15.html>
- Yi, M., Tang, W., Zhu, Y., Liang, C., Tang, Z., & Yin, Y. (2023). A holistic review on fatigue properties of additively manufactured metals. *arXiv preprint*. (査読前のプレプリント) <https://arxiv.org/abs/2311.07046>

- Altıparmak, S. C., Lombardi, M., Bondioli, F., Fino, P., Biamino, S., & Ugues, D. (2025). Hot isostatic pressing for powder-based additive manufacturing of metals: State-of-the-art review and future perspectives. *Journal of Materials Research and Technology*, 39, 4794-4822. <https://doi.org/10.1016/j.jmrt.2025.10.135>
- Murakami, Y. (2002). *Metal Fatigue: Effects of Small Defects and Nonmetallic Inclusions*. Elsevier Science, Oxford, UK.
- Basquin, O. H. (1910). The exponential law of endurance tests. *Proceedings of the American Society for Testing and Materials*, 10(2), 625-630.
- Coffin, L. F. (1954). A study of the effects of cyclic thermal stresses on a ductile metal. *Transactions of the American Society of Mechanical Engineers*, 76(6), 931-950.
- Manson, S. S. (1953). Behavior of materials under conditions of thermal stress. National Advisory Committee for Aeronautics (NACA) Technical Note, NACA-TN-2933.
- Arola, D., & Ramulu, M. (1999). An examination of the effects of surface texture on the strength, fatigue life, and stress concentration of machined components. *Journal of Engineering Materials and Technology*, 121(3), 376-381.
- Blavette, D., Cadel, E., Fraczkiewicz, A., & Menand, A. (1999). Three-dimensional atomic-scale imaging of segregation and precipitation in superalloys. *Science*, 286(5448), 2317-2319. <https://doi.org/10.1126/science.286.5448.2317>
- Wang, Q., Yao, G., & Hou, M. (2026). Fatigue life prediction and uncertainty quantification of aerospace metals: A Bayesian physics-informed neural network model. *Reliability Engineering & System Safety*, 266, 111724. <https://doi.org/10.1016/j.ress.2025.111724>
- Zhang, D., Dai, W., & Ding, Y. (2025). Bayesian optimization-based physics-informed neural network for adaptive prediction of multiaxial fatigue life in metallic materials. *Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures*, 49(1), 28-51. <https://doi.org/10.1111/ffe.70101>
- Chang, J., Basvoju, D., Vakanski, A., Charit, I., & Xian, M. (2025). Predictive modeling and uncertainty quantification of fatigue life in metal alloys using machine learning. *arXiv preprint*. (査読前のプレプリント) <https://arxiv.org/abs/2501.15057>
- Li, L., Chang, J., Vakanski, A., Wang, Y., Yao, T., & Xian, M. (2024). Uncertainty quantification in multivariable regression for material property prediction with Bayesian neural networks. *Scientific Reports*, 14, 10543. <https://doi.org/10.1038/s41598-024-61189-x>
- Vishnu, S., Kuriachen, B., & Mathew, J. (2026). Microturning response of LPBF Inconel 718: Effect of homogenization annealing. *Materials and Manufacturing Processes*, 41(7), 964-973. <https://doi.org/10.1080/10426914.2026.2660062>
- Truong, T. T., Airao, J., Fattahi, S., Azarhoushang, B., Karras, P., & Aghababaei, R. (2025). Image-based machine learning model for tool wear estimation in milling Inconel 718. *Wear*, 571, 205865. <https://doi.org/10.1016/j.wear.2025.205865>
- Abdullah, M., Rao, A. C. U., Ramachandran, T., Biswal, S., Chaudhary, S. P., Singh, R., Mishra, A., & Mann, V. S. (2026). A data-driven approach for high-accuracy tool wear prediction in machining Hastelloy C276. *Scientific Reports*, 16, 19442. <https://doi.org/10.1038/s41598-026-50824-4>
- Medibew, T. M., Zieliński, D., Agebo, S. W., & Deja, M. (2025). Recent research progress in the abrasive machining and finishing of additively manufactured metal parts. *Materials*, 18(6), 1249. <https://doi.org/10.3390/ma18061249>
- Liu, Y., Zhao, L., Huang, S., Meng, X., Zhang, Z., Lu, H., Zhou, S., & Dai, G. (2026). Recent progress in surface post-treatment techniques for additive manufactured alloy metal parts: A comprehensive review. *Additive Manufacturing Frontiers*, 200339. <https://doi.org/10.1016/j.amf.2026.200339>
- Hassan, M., Hussain, M. A., & Jahan, M. P. (2026). Post-processing of additively manufactured metallic parts - A review. *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*. <https://doi.org/10.1007/s00170-026-18615-3>
- Sommer, D., Truetsch, B., Esen, C., & Hellmann, R. (2025). Effect of hot isostatic pressing and sequenced heat treatment on the mechanical properties of hybrid additive manufactured Inconel 718 components. *Journal of Manufacturing and Materials Processing*, 9(11), 378. <https://doi.org/10.3390/jmmp9110378>
- Kaletsch, A., Qin, S., Herzog, S., & Broeckmann, C. (2021). Influence of high initial porosity introduced by laser powder bed fusion on the fatigue strength of Inconel 718 after post-processing with hot isostatic pressing. *Additive Manufacturing*, 47, 102331. <https://doi.org/10.1016/j.addma.2021.102331>
- Fody, J. M., & Lang, C. G. (2021). Hot isostatic pressing for reduction of defects in additively manufactured Inconel-718: Preliminary simulation approach and results. NASA Technical Reports Server, Document ID 20210015451. <https://ntrs.nasa.gov/citations/20210015451>
- Baig, S., Jam, A., Beretta, S., Shao, S., & Shamsaei, N. (2025). Non-destructive detection of critical defects in additive manufacturing. *Scientific Reports*, 15, 6740. <https://doi.org/10.1038/s41598-025-91608-6>
- Novelino, A. L. B., de Oliveira, D., Araújo, J. A., & Ziberov, M. (2026). Defects characterization of wall components fabricated via WAAM and fatigue strength estimation: A theoretical prediction approach based on Murakami's square root of area method. *Progress in Engineering Science*, 3(1), 100238. <https://doi.org/10.1016/j.pes.2026.100238>
- He, P., Huang, Y., Wang, W., Guo, Y., Yu, Z., Chen, W., Li, B., & Wang, X. (2025). Deep learning driven prediction method for roughness and hardness of laser in-situ forging additive manufacturing Ti-6Al-4V. *Virtual and Physical Prototyping*, 20(1), e2569541. <https://doi.org/10.1080/17452759.2025.2569541>

第8章 物理情報機械学習（PIML/PINNs）と演算子学習（FNO）を通じた気体反応流動および燃焼化学モデリング

はじめに

キッチンのガスコンロに火をつけると青い炎が上がる。燃料であるガスと空気中の酸素が会って熱を出す。この過程を燃焼と呼ぶ。燃焼は私たちの生活のいたるところにある。自動車のエンジンも、ボイラーも燃焼によって動く。

ロケットエンジンも同じ原理で力を生み出す。ただ規模と条件が大きく異なる。ロケットの燃焼室内ははるかに高温で圧力も高い。燃料と酸素が極めて速く混ざり合い、反応する。その中で気体は流れ、渦を巻き、音を立てる。

これらすべての現象を一度に計算することは難しい。化学反応は瞬く間に起こる。一方、燃焼室全体を循環する流れはそれよりも遅い。速い変化と遅い変化が同一空間に混ざり合っている。コンピュータがこの二つを同時に追跡しようとする、計算量が大幅に増大する。

これまでは方程式を非常に細かく分割して解いてきた。この手法を数値流体力学（CFD）という。正確ではあるが計算コストが大きい。大型ロケットの燃焼室を詳細に解くには、スーパーコンピュータを何日も稼働させなければならない。設計者はより高速なツールを長年求めてきた。

人工知能はこの局面で助けとなる。十分に学習したニューラルネットワークは計算を素早く削減してくれる。センサーが少ないときに欠落した情報を補完してくれることもある。しかし、燃焼問題において人工知能が勝手な答えを出すと危険である。ロケットでは小さな誤差一つが重大な事故につながるからである。

そこで物理法則を学習の中に直接組み込む手法が登場した。この手法を物理情報機械学習（PIML）という。ニューラルネットワークはデータのみを模倣するのではない。質量保存やエネルギー保存といった法則も同時に守るように作られる。その代表的な手法が物理情報ニューラルネットワーク（PINN）である。

本章では、その物理情報学習の多様な手法を取り扱う。まず燃焼を支配する方程式を言葉で紐解く。次に、高速な化学反応が生み出す計算の難しさを考察する。続いて、コルモゴロフ・アーノルド・ネットワーク（KAN）という新しい構造を見る。そして、関数を関数に変換するフーリエ・ニューラル・オペレータ（FNO）を紹介する。最後に、回転デトネーションエンジン内部を復元する事例で締めくくる。

ここで一つの例を挙げてみよう。地図を描く二つの方法を思い浮かべればよい。一つは、すべての土地を一步一步歩いて測量する方法である。正確だが時間が長くなる。もう一つは、数箇所だけを測量し、残りを補完する方法である。高速だが、規則なしに補完すれば見当違いな地図になってしまう。物理情報学習は、この補完に自然の規則を組み込む作業である。

本章を読み終えれば、全体像を把握できるようになる。人工知能が燃焼計算をどのように変えつつあるのかが見えてくる。何がすでに可能で、何がまだ困難であるかも区別がつく。新しいツールは強力だが万能ではない。物理と検証が揃って初めて信頼できる。このバランスを取ることが、本章を貫く考え方である。

本書は難解な名称や数値を慎重に扱う。近年の研究の中には名前ばかりが立派な事例もある。根拠が確認されていない性能の数値も混ざっている。そのため本章では、確認された研究のみを厳選して解説する。確認できていない数値は本文に記載しない。初期段階の研究は初期研究であると明確に断っておく。

8.1 計算燃焼工学のパラダイムシフトと人工知能

本節で扱うこと

本節では、燃焼計算がなぜ難しいのかから紐解く。ロケットの燃焼室内で起きている現象がどれほど複雑であるかを見る。そして、従来の計算手法の限界を考察する。その限界を克服するために人工知能がなぜ登場した

のかを説明する。

ここでは難解な数式は用いない。代わりに日常生活の場面に概念を置き換えてみる。本節を理解すれば、以降のすべての節が理解しやすくなる。本章全体が、結局はこの問題を解決するための多様な手法だからである。

ロケットの燃焼室内は極限環境である。温度は数千度にまで達する。圧力は大気圧の数百倍に達する。燃料と酸化剤が短時間で激しく反応する。メタンと液体酸素を用いるエンジンが代表例である。

こうした反応は見かけよりもはるかに複雑である。メタンが酸素と出会って水と二酸化炭素になる経路は一つではない。その過程で数十種類の間物質が現れる。ラジカルと呼ばれるこれらの物質は反応性が極めて高い。そのため、数百もの素反応が複雑に絡み合って同時に進行する。

ラジカルをリレー競技に例えてみよう。バトンが手から手へと素早く渡される。一人の走者がバトンを長く握り続けることはない。ラジカルも一瞬で生成されては次の物質へと移行する。この目まぐるしい受け渡しで燃焼を駆動する。その速度を見落とすと、炎の姿を正しく描くことができない。

ここに乱流まで重なる。乱流とは気体が渦を巻き、激しく混ざり合う流れである。川の水が岩にぶつかって白く砕け散る様子に似ている。ロケットの燃焼室内の気体もこのように混ざり合う。乱流は燃料と酸素を素早く接触させる。しかし、その不規則な動きのために計算はさらに難しくなる。

この反応を精密に解くには、時空間を極めて細かく分割しなければならない。薄い火炎が形成される場所は、その厚さが髪の毛よりも薄い。その中で温度と濃度が急激に変化する。この薄い層を見落とすと計算が狂ってしまう。そのため、この層まで捉えるには格子を極めて細かく配置しなければならない。

このマルチスケール問題を数値で実感してみよう。火炎が形成される薄い層は数十マイクロメートルである。一方、燃焼室全体の長さは数十センチメートルに及ぶ。スケールの差は数千倍に達する。時間に関しても同様の格差が生じる。この広範なスケールを一度に捉えようとすると、格子数が爆発的に増大する。

従来の計算手法には直接数値シミュレーション（DNS）とラージエディシミュレーション（LES）がある。直接数値シミュレーションは、極めて小さな渦まで一つも漏らさずすべて解く。ラージエディシミュレーションは大きな渦のみを解き、小さな渦は近似する。どちらも高精度だが計算量が膨大である。大型の燃焼室を詳細に解くと、膨大な時間がかかる。

計算コストが大きいという言葉は日常の言葉に置き換えてみよう。高画質映画を1本制作する作業に似ている。シーンの一つひとつを細密にレンダリングすれば何ヶ月もかかる。燃焼計算も同様である。条件を変更するたびに最初から描き直さなければならない。設計者は数十種類もの条件をテストしたいと考える。しかし、条件を変えるたびに何日も待つことは現実的ではない。

ここに人工知能が新たな道を切り拓く。ニューラルネットワークは一度十分に学習すれば、類似した問題に対して素早く回答を出す。重い計算を代替する軽量の代理モデル（サロゲートモデル、surrogate model）となる。代理モデルとは、元の計算を模倣する高速な近似モデルである。設計者は多様な条件を短時間で検討できるようになる。

代理モデルを地図アプリに例えてみよう。実際に道を歩いてみなくても所要時間を教えてくれる。無数のルートを一瞬で比較してくれる。代理モデルも同様である。実際の計算をすべて実行することなく結果を見積もる。そのおかげで、複数の設計案を短時間で検討することができる。

ただし、地図アプリも見慣れない道では間違えることがある。代理モデルも学習した範囲を外れると狂いが生じる。そのため、見積もった答えを鵜呑みにはしない。重要な決定の前には精密計算で再確認する。代理モデルは進むべき方向を示す羅針盤であって、最終判定ではない。この姿勢が本章全体に一貫して流れている。

超臨界状態についてももう少し詳しく説明しよう。水を例にとると理解しやすい。通常は水が沸騰して水蒸気になる。液体と気体の境界は明瞭である。しかし、圧力と温度を極めて高くするとその境界が曖昧になる。ロケットの高圧燃焼室内の燃料がこのような状態にある。液体と気体のこの曖昧な境界を正確に計算することは非常に難しい。

実際の事例も登場している。DeepFlame（ディープフレイム）は、ニューラルネットワークを組み込んで超臨界燃焼を高速に計算するソフトウェアである。超臨界とは、液体と気体の境界が曖昧になる高圧状態を指す。研究チームはこのコードを最適化し、メタンと酸素の乱流燃焼を大規模に解いた。公開資料によると、計算規模を数百億セル水準にまで拡大した。これは従来よりも大幅に拡張された範囲である。この成果は2025年の高性能計算（HPC）学会で発表された初期研究である。

この事例において人工知能が担う役割は明確である。化学反応計算は長時間を要する部分である。ニューラルネットワークがこの計算を高速に代行する。その一方で、実際の流体の性質はそのまま保持する。速度と精度の両立を目指す試みである。このような方向性が、大型ロケットの燃焼計算の実用化を前倒しにする。

大規模な計算がなぜ重要であるかを整理してみよう。実際のロケットエンジンにはインジェクターが数百個存在する。インジェクターとは燃料と酸素を噴射して混合する部品である。これら多数のインジェクターから生じる火炎が互いに影響を及ぼし合う。小規模な計算ではこの相互作用を捉えきれない。大規模計算が可能になって初めて、実機のエンジンに近づくことができる。

人工知能が燃焼分野に導入されるアプローチは大きく分けて三つある。一つは、長時間を要する計算を代替する高速な代理モデルである。もう一つは、疎らな測定データから場全体を再現する復元である。残る一つは、リアルタイムで状態を診断し制御することである。本章では前者の二つのアプローチに焦点を当て、三つ目の制御については後続の章で扱う。

人工知能が物理法則を破ると重大な危険をもたらす例を挙げてみよう。あるモデルが温度を実際よりも低く予測したとする。設計者は壁面が耐えられると判断してしまう。しかし、実際の温度がより高ければ壁面は溶損する。小さな誤差が重大な事故へとつながる。そのためロケットにおいては、物理法則を守ることが安全性に直結する。

もちろん限界も明確である。人工知能は学習した範囲の外では頻繁に誤りを犯す。ロケットでは未知の条件が常に現れる。物理法則を守らなければ予測は極めて危険なものとなる。そのため本章全体を通じて、物理と学習を統合する手法を扱う。2026年には航空宇宙推進のための物理情報学習をまとめた総説（レビュー）も発表された。この潮流は、この分野が急速に発展していることを示している。

8.2 多成分圧縮性反応流の支配方程式と物理情報学習

本節で扱うこと

本節では、燃焼を支配する基礎方程式を言葉で紐解く。方程式と聞くと難しく感じられるかもしれない。しかし、その意味は極めてシンプルである。何ものも理由なく消失したり生成したりはしないという規則である。

続いて、この規則をニューラルネットワークに組み込む手法を見る。物理情報ニューラルネットワークがどのように法則を守るのかを考察する。この二つの概念が本章の骨格である。以降に登場するすべての手法は、この二つの概念から派生している。

8.2.1 反応性ナビエ・ストークス支配方程式

ナビエ・ストークス方程式は流体の運動を記述する規則である。水が流れ、空気が吹く現象をこの規則によって解く。ロケットの燃焼では、ここに化学反応と熱までもが加わる。そのため、連立して解くべき方程式が複数に増大する。

反応を伴わない通常の流体であれば、質量、運動量、エネルギーという三つの平衡（バランス）を考慮すれば十分である。しかし、燃焼のように化学反応を伴う流体では、化学種の保存がもう一つ加わる。したがって、これらの方程式は四つの保存則を内包する。その第一が質量保存である。流入した気体の量と流出した気体の量が一致しなければならない。気体は勝手に生成されたり消滅したりすることはない。質量が過不足なく釣り合うこの平衡が、すべての計算の基礎となる。

次は運動量保存である。運動量とは質量と速度を掛け合わせた量である。力を受けると運動量が変化する。圧力差と粘性がこの力を生み出す。ロケットの内部で気体が高速で押し出される理由がここにある。

運動量保存を自転車に例えてみよう。ペダルを踏み込むと自転車は前進する。踏み込む力が速度の変化を生み出す。ロケットの内部では、圧力差がその力となる。粘性とは流れ同士が引き留め合って減速させる摩擦である。圧力差と粘性というこれら二つの力が、気体の速度を変化させる。

もう一つは化学種保存である。化学種とは酸素、メタン、水のように反応に関与する物質のことである。反応が起こると、ある物質は減少し、ある物質は増加する。その増減の量を反応速度が決定する。反応流体では物質ごとにこのような保存式を個別に立てる。そのため、化学種の数だけ方程式が追加される。最後はエネルギー保存である。反応によって生じた熱が気体を温め、流れを押し出す。

エネルギー保存は貯金箱に例えることができる。入れたお金と使ったお金を照合すれば、残るお金が計算できる。燃焼において化学反応が新たなエネルギーを無から生み出すことはない。燃料の内部に蓄えられていた化学エネルギーが熱へと変換されるだけである。その熱が気体を温め、仕事をして系外へと出ていく。放射によって逃げる熱もある。これらすべての出入りを整合させる規則がエネルギー保存である。

圧縮性という言葉も極めて重要である。圧縮性とは、圧力に応じて気体の密度が大きく変化することを意味する。ロケットの燃焼室は圧力が高く、変動も激しい。そのため密度を一定値に固定することができない。密度が絶えず変化するというこの点が、計算をいっそう困難にする。

これら4つのバランスがなぜそれほど重要であるかを確認してみよう。バランスが崩れた計算はやがて嘘になる。質量が勝手に増えれば、本来なかった推進力が生まれたことになる。エネルギーが漏れれば温度予測が狂う。ロケット設計において、このような誤差は直ちに事故へとつながる。したがって、人工知能もこのバランスを必ず守らなければならない。

化学反応速度はアレニウスの法則によって定まる。アレニウスの法則は、温度が上がると反応が急激に速くなるという規則である。マッチの火が一度つけば瞬く間に燃え広がるのと似ている。この急激な性質が、後述する計算問題の根本原因となる。ロケット設計者はこの反応を精密に予測してこそ安全を守ることができる。

拡散と熱伝達も同時に解かなければならない。拡散とは、濃度の高い場所から低い場所へと物質が広がる現象である。台所から香りが部屋の中へと広がるのと同じである。熱伝達は、熱い場所から冷たい場所へと熱が移動する現象である。燃焼室内では、これら2つが化学反応と同時に起こる。そのため、方程式が互いに絡み合い、一体として解かれる。

8.2.2 物理情報に基づく複合損失関数

物理情報ニューラルネットワークの核心は損失関数にある。損失関数はニューラルネットワークがどれほど間違っているかを測る尺度である。通常のニューラルネットワークはデータとの差のみを測る。物理情報ニューラルネットワークはここに物理誤差を加える。

動作の仕組みは次のとおりである。ニューラルネットワークは位置と時間の入力を受け取る。すると、その地点における圧力、温度、速度、濃度を出力する。これらの値が保存方程式を満たしてこそ正しい。これらの値が方程式を満たせなければ、その分ペナルティを受ける。

この物理誤差を測るには微分が必要である。ここで自動微分 (automatic differentiation) が用いられる。自動微分はニューラルネットワークの計算過程をたどりながら微分を求める技術である。格子の差から概算する有限差分とは異なる。そのため、有限差分で生じる打ち切り誤差がない。ただし、ニューラルネットワーク自体の近似誤差や、サンプル点の選択に起因する誤差は残る。自動微分が排除するのは、微分を概算する際に生じる誤差である。

なぜ微分が必要なのかを確認してみよう。保存方程式は変化の割合を扱う。圧力がどれほど速く変化するか、速度がどのように変わるかを見る。この変化の割合こそが微分である。ニューラルネットワークが出力した値の変化を微分によって求める。そうして得られた変化率が方程式を満たしているかを確認する。

従来の計算は格子上で微分を近似した。隣接する格子点の差によって変化を概算した。この手法は格子が粗いと誤差が大きくなる。自動微分はこの近似を用いない。ニューラルネットワークの数式をそのまま微分する。そのため、微分のために細かい格子を別途配置する必要がない。ただし、物理誤差を測る地点は選ばなければならない。この地点を配置点と呼ぶ。配置点を粗く配置しすぎると解が揺らぐ。格子から自由であるということが、どこでも正確であるという意味ではない。

損失関数には複数の項が共に入る。データとの差が1つの項である。質量、運動量、エネルギー、化学種の方程式の誤差がそれぞれ項となる。境界条件と初期状態も項として組み込む。学習はこれら複数の項の重みを調整しながら同時に減らしていく。

このようにすれば大きな利点が生じる。データが少なくても物理法則が空白を埋める。実験室では壁面圧力センサーや光学プローブ程度しか使えない。このようなまばらな測定だけでは全体の流れを把握することはできない。物理法則を規則として設定しておけば、その間を埋めることができる。

この性質は逆問題を解く際に真価を発揮する。通常の計算は原因を入力して結果を得る。逆問題は結果を見て原因を探る。壁面温度だけを見て内部の熱源を特定することがその例である。物理情報ニューラルネットワークはこのような逆問題に強い。測定データと物理法則を単一の損失関数内で同時に扱うからである。

ロケット試験においてこの能力は貴重である。燃焼室の内部に多数のセンサーを設置することは困難である。高温かつ狭小であるためセンサーが耐えられない。そのため、外部からわずか数点のみを測定する。この数点から内部の状態を再現することが重要な課題となる。物理情報ニューラルネットワークが測定と内部状態の間に架け橋を架ける。

この損失関数には、重み付けという難しさが潜んでいる。各項の重要度をどのように決定するかが問題となる。ある項に過大な重みを与えると、他の項が無視されてしまう。物理誤差ばかりを追えばデータを見失う。データばかりを追えば物理法則に反する。このバランスを取る方法が研究の大きなテーマとなっている。

この重み付けを料理の味付けに例えてみよう。塩が強すぎれば塩辛く、砂糖が強すぎれば甘くなる。どちらか一方が過剰になれば味が損なわれる。損失関数の複数の項も同様である。ある項が過度に強すぎると、学習が一方に偏る。そのため、重みを自己適応的に調整する方法も研究されている。

この概念を初めて広く知らしめた研究が、Raissiらによる2019年の論文である。その後、燃焼分野へと幅広く普及した。2025年には燃焼のための物理情報学習をまとめた包括的なレビューも発表された。このレビューは化学反応、反応流動、その他の燃焼問題へと類型を分類している。物理情報学習が一つの大きな潮流となったことを示している。

限界についても率直に見据える必要がある。物理情報ニューラルネットワークはある一つの条件に合わせた解をよく見つけ出す。しかし、条件が変わると再学習が必要になる場合が多い。広範な条件を一度に包括することは未だ困難である。強い衝撃波や急激な火炎面において学習が不安定になることもある。この弱点を補うための研究が現在も続けられている。

8.3 スティッフな反応動力学と保存制約物理学習

8.3.1 化学反応の数値的スティッフ性と標準学習の破綻

スティッフ性は、ある変化が極めて速く、ある変化が遅い場合に生じる。燃焼化学においてはこのような状況が頻繁に見られる。ラジカルのような中間物質は一瞬にして生成し消滅する。一方で、温度や主成分は比較的ゆっくりと変化する。

この時間差がどれほど大きいかを見てみよう。速い反応は10億分の1秒単位で進行する。遅い流れは1000分の1秒単位で動く。2つのスケールの差は100万倍を超える。この極めて大きな隔たりが、計算を不安定にするスティッフ性の根本原因となる。

速い変化と遅い変化を同じ時間刻みで解くと問題が生じる。刻み幅を速い反応に合わせると計算が果てしなく長くなる。遅い流れに合わせると速い反応を見落として計算が発散する。従来の数値解析もこの点で長年苦闘してきた。そのため、従来の数値解析は特別な時間積分法によってこれを扱ってきた。

この時間的な隔たりは写真撮影に似ている。ハチドリの羽ばたきとカメの歩みを1枚の写真に収めるとしよう。ハチドリに合わせればシャッターを無数に切らなければならない。カメに合わせればハチドリはブレてしまう。1つの画面に双方を綺麗に収めることは難しい。燃焼における速い反応と遅い流れもこれと同様である。

標準的な物理情報ニューラルネットワークはここでしばしば破綻する。このニューラルネットワークはすべての誤差を一度に減らそうとする。速い反応が生み出す大きな誤差が学習を支配してしまう。そうすると、遅い変数のバランスを適切に学習することができない。このように学習が一方に偏る現象を勾配病理 (gradient pathology) と呼ぶ。

この病理を状況に例えてみよう。大きな声の1人が会議を独占しているとしよう。静かな人々の声はかき消される。会議は一方だけに偏る。速い反応の大きな誤差こそがその大声である。そのため、遅い変数のバランスは学習において後回しにされてしまう。

ここにはさらに2つの原因が潜んでいる。1つは、ニューラルネットワークが急激な変化を後回しにして学習する性質である。ニューラルネットワークは緩やかな流れを先に習得し、鋭い変化を後回しにする。この性質をスペクトルバイアス (spectral bias) と呼ぶ。点火の瞬間の急激な変化がまさにこの鋭い部分である。もう1つは、時間の因果律を守れないという問題である。燃焼においては、先行する瞬間がその後の瞬間の原因となる。しかし、標準的な学習はすべての時間を一度に適合させようとする。すると原因と結果の順序が乱れてしまう。ひどい場合には、何の反応も起こらない平坦な解へと縮退してしまう。そのため、時間を分割して順番に学習させたり、化学種ごとに重み付けを変えたりする手法が提案された。

もう一つの問題は、保存則の破綻である。複数の項を同時に重み付けしているとバランスが崩れる。化学種濃度の合計は常に一定でなければならない。原子の数も反応の前後で同一でなければならない。この規則が破られると、負の濃度のようなあり得ない値が出力される。

負の濃度がなぜ重大な問題であるかを確認してみよう。ある物質の量が負の数になるということは現実には存在しない。水がマイナス1杯ということはある得ない。計算がこのような値を出力すると、次のステップが破綻する。反応速度の計算が暴走するか、停止してしまう。そのため、濃度が負の値に落ち込まないように必ず防がなければならない。

この問題を扱った初期の研究がいくつか存在する。Jiらによる2021年のStiff-PINNが代表的である。この研究はスティッフな化学反応を扱うために特別な処理を導入した。マルチスケール物理情報ニューラルネットワークも同時期に登場した。これらの研究は、スティッフ性が学習においてどれほど大きな壁であるかを実証した。

この壁がロケットにおいてさらに高くなる理由がある。メタンと酸素の燃焼には多くの反応経路が存在する。扱う物質は数十種に及ぶ。物質が増えればスティッフ性も共に増大する。したがって、ロケット燃焼はスティッフ問題の最も困難な領域に位置する。物理法則をより強固に制約する手法がそれほど切実に求められる。

8.3.2 保存制約と時間積分の結合

スティッフ問題を解決する鍵は、物理法則をより強固に課すことにある。物理法則を制約する方法は大きく分けて2つある。1つは、規則に違反した際にペナルティを付与するソフト制約である。損失関数に物理誤差の項を加える手法がこれに該当する。もう1つは、規則を決して破ることができないように構造に直接組み込むハード制約である。スティッフ性が深刻であるほど、これら2つの手法を組み合わせる用いる。

第1のツールは、検証済みの時間積分器をニューラルネットワークと結合することである。ルンゲ・クッタ法は、時間を少しずつ刻んで微分方程式を解く標準的な技術である。ただし、その種類を見極めなければならない。前方の値から直接推し進める陽解法は、スティッフ問題に脆弱である。安定して解くためには時間刻みを過度に細かく分割しなければならない。そのため、スティッフ問題には陰解法系列の安定した積分法を用いる。

ニューラルネットワーク内にこのように安定性が検証された積分構造を組み込む。そうすれば、ディープラーニングは長年蓄積された数値解析の安定性を継承することができる。

第2のツールは、保存を強制する射影である。ニューラルネットワークが出力した濃度をそのまま使用することはない。まず、値を常に正数へと変換する。次に、合計が一定になるように再調整する。最後に、原子数が保存されるように値を調整する。このプロセスを経ることで、物理法則に反した値が出力されることを完全に防ぐことができる。

射影を門番に例えてみよう。ニューラルネットワークがどのような値を出力しようとも、門の前で検査する。規則に合致していなければ、最も近い正しい値へと修正する。負の数は正の数へと戻す。合計が狂っていれば再び調整する。そのため、外部へと出力される値は常に規則を守っている。

この手法にはソフト方式とは異なる点がある。ソフト方式は規則に違反した際にペナルティを与えるに過ぎない。ペナルティは学習を誘導するだけであり、違反そのものを防ぐことはできない。ハード方式は違反そのものを構造によって遮断する。学習が不十分であっても物理法則は守られる。そのため、安全性が何よりも重要となるロケットに適した手法である。

実際の事例としてCRK-PINNがある。この研究は燃焼反応速度方程式を物理情報ニューラルネットワークによって解いた事例である。著者はSihong Zhang、Qi Zhang、Baosen Wangである。この論文は査読を経て学術誌『Combustion and Flame』に掲載された。この手法は物理法則を損失関数の項として組み込むソフト制約を用いている。質量作用の法則とアレニウスの法則を損失関数に組み込んだ。エンタルピー保存と元素保存、濃度合計保存も同様の手法で課した。先述のハード射影とは異なり、ペナルティによって物理法則を誘導するアプローチである。

性能も公開されている。水素と空気の反応系において計算が高速化した。10種の化学種と21の反応を扱った。標準的な計算と比較して約6倍から14倍高速であった。実際の反応流動計算と結合した場合でも約2倍から5倍高速であった。これは物理法則を守りながらも計算速度の向上を同時に達成した事例である。

何倍も高速化したという言葉の意味を確認してみよう。化学反応の計算は、燃焼解析において時間を要する大きな部分である。全体の計算時間の大半がここで費やされる。この部分を10倍高速化できれば、全体が大幅に短縮される。数日かかっていた計算が1日に短縮される。その分、設計を変更して再試験するサイクルが加速する。

ここでソフト制約とハード制約を混同しないよう確認しておく。CRK-PINNは物理法則を損失によって誘導するソフト方式である。値を強制的に修正するハード射影とは性質が異なる。両方式は併用することも、単独で使用することも可能である。ソフト制約は柔軟であるが物理法則の違反を完全に防ぐことはできない。ハード制約は違反を防ぐことができるものの構造が複雑化する。どちらをどの程度適用するかが設計上の判断となる。

この方式が与える教訓は明快である。検証された数値解析の知識を捨てないという点だ。ルンゲ・クッタ法のような手法は何十年もの間磨き上げられてきた。人工知能はこの知識の上に乗って力を伸ばす。古い物理の知見と新しい学習が対立せず、互いに助け合う方式である。

ただし限界も明確である。このような手法は扱った反応系の内部で検証されたものだ。ロケットのメタンと酸素の燃焼はより複雑である。物質と反応の数がはるかに多い。新たな反応系へと移行するには、再度学習し検証しなければならない。物理条件を強く課すほど計算が重くなるトレードオフもある。

8.4 コルモゴロフ・アーノルド・ネットワークに基づく反応流動モデリング

8.4.1 結合線に関数を載せる基礎と適応活性化関数

まず通常のニューラルネットワークの構造を思い浮かべてみよう。ニューラルネットワークはノードとノードを結ぶ結合線で構成される。ノードには固定された活性化関数が置かれる。結合線には重みという数値だけが付く。学習はこの重みの数値を調整する作業である。

活性化関数という言葉をまず解きほぐしてみよう。ニューラルネットワークは入力を受け取り、ある曲線を通して出力する。この曲線が活性化関数だ。通常のニューラルネットワークはこの曲線の形状を固定する。決められた複数の曲線を重ね合わせて複雑な関係を作り出す。学習は曲線の形状はそのままにして、重ね合わせる強さだけを変える。

コルモゴロフ・アーノルド・ネットワークはこの配置を逆転させる。ノードではなく結合線の上に関数を置く。その関数自体を学習によって変化させる。決まった形状を使わず、曲線を柔軟に形作る。この発想は昔に証明された一つの数学の定理に由来する。

その定理がコルモゴロフ・アーノルドの表現定理である。この定理は、複雑な関数を単純な1次元関数の総和として表すことができると述べている。この構造は各結合線の関数を柔軟な曲線として表現する。この曲線は局所的に形状を変えることができる。そのため、火災のように変化が急激な箇所だけを選んで細かく調整することができる。

この定理をブロック積みにも例えてみよう。どれほど複雑な形状であっても、いくつかの基本ブロックの組み合わせである。大きな構造を小さな破片に分け、再びつなぎ合わせる。複雑な関数も単純な1次元の断片の和へと分解できる。コルモゴロフ・アーノルド・ネットワークはこの分解を構造の基礎とする。昔の数学が新しいニューラルネットワークの基盤となったわけだ。

この曲線を作る材料がBスプラインである。Bスプラインは複数の部分曲線を滑らかにつなぎ合わせる手法だ。自動車の設計者が滑らかな曲線を描く際に用いるツールと同系統のものである。各断片は自身の区間でのみ影響を及ぼす。そのため、一箇所を修正しても他の箇所が崩れることはない。

この局所性が学習にもたらす利点がある。火災が形成される狭い区間だけを細かく分割できる点だ。残りの広い区間は粗いままにしておく。リソースを必要な場所に集中して使う方式である。これをグリッド細分化と呼ぶ。これにより計算量を節約しつつ、必要な精度を確保できる。

この性質がなぜ優れているか見えてくる。どの入力がどの出力に影響を与えているかがより明確に見える。必要な区間だけを高精度に表現できる。関数を目で見て詳細に分析することも容易だ。燃焼のように局所的な変化が激しい問題に適している。

ノードとエッジの違いを身近な例に置き換えてみよう。通常のニューラルネットワークは、決められた形状のレンズを何枚も重ねる方式だ。レンズの形状は固定されており、重ねる強さだけを調節する。コルモゴロフ・アーノルド・ネットワークはレンズの形状そのものを削り出す。そのため、望む屈折をより自在に作り出せる。その代わり、レンズを削り出す作業にはより多くの手間がかかる。

もちろん、この構造が万能というわけではない。学習がより難しくなる場合がある。曲線を細かく分割するほど、調整すべき値が増加する。問題によっては通常のニューラルネットワークのほうが適していることもある。新しい構造は選択肢の一つとして捉えるのが妥当である。

8.4.2 火災面の表現力とパラメータの軽量化

火災面は反応が集中する薄い領域である。ここでは極めて短い距離で温度が急上昇する。常温の気体が一瞬にして数千度に達する。濃度も急激に変化する。この狭い区間における急峻な変化を計算によって表現することは容易ではない。

通常のニューラルネットワークは、このような急激な変化に弱い。固定された活性化関数では、急峻な界面を滑らかに描くことが難しい。無理に合わせようとすると、周囲に細かな波のような誤差が生じる。高周波情報を学習するのが遅いという性質もある。こうした性質により、火災面計算の結果が不鮮明になってしまう。

この細かな波を旗の絵に例えてみよう。まっすぐに立った棒を柔らかい筆だけで描くとしよう。棒の鋭い角の横に波紋のような模様ができてしまう。計算においても、鋭い火災面の横に不要な擬似パターンが現れる。このパターンは現実には存在しない偽物である。このような偽の模様が、実在しない信号として予測を狂わせる。

コルモゴロフ・アーノルド・ネットワークはこの点において強みを発揮できる。柔軟な曲線によって急峻な層をより正確に描くことができる。火炎が形成される狭い区間だけを選んで細かく分割できる。不要な箇所は粗く配置して無駄を省く。このようにリソースを適切に配分する適応能力が、燃焼計算に非常によく合致する。

その実例がChemKANsである。著者はケーニヒ、キム、デンである。この研究は2025年に学術誌『Physical Chemistry Chemical Physics』に掲載された。コルモゴロフ・アーノルド・ネットワークに反応速度と熱力学の法則の流れを取り入れた。燃焼化学モデルを学習し、計算を高速化することが目標である。ただし、この研究が検証したのは空間に広がる火炎面ではない。時間経過に伴って物質が反応する化学反応器の問題を学習したものである。ロケット燃焼室内の空間火炎面や衝撃波の再現は今後の課題として残されている。

公開された結果は実用的である。このモデルは極めて少数の調整値で動作した。ノイズが混ざったデータでも過学習を起こさずに良好に学習した。最大15パーセントのノイズにも耐えた。標準的な計算と比較して約2倍高速な結果も示した。同研究チームは、圧力に応じて反応速度を学習する後続の初期研究も発表している。

ノイズに強いという意味を解きほぐしてみよう。実際の計測には常にノイズが混ざる。センサーが完全ではないためだ。ノイズに弱いモデルはこの雑音までも暗記してしまう。これを過学習と呼ぶ。ノイズに強いモデルは真の規則だけを選び出して学習する。

過学習を試験勉強に例えてみよう。解答だけを丸暗記した生徒は、問題が変わると間違えてしまう。原理を理解した生徒は新しい問題も解くことができる。ノイズに強いモデルは原理を学んだ生徒と同じである。ロケットの計測データにはノイズが多い。そのため、ノイズに強いというこの性質はロケット計測において価値が高い。

このモデルの強みは、確認された範囲内で語るべきである。確認された点は3点ある。調整値が少ないという点、ノイズに強いという点、標準的な計算と比較して約2倍高速であるという点だ。これ以上の性能を謳う数値については、まだ検証が必要である。したがって本書では、確認されたこの範囲のみを述べる。

コルモゴロフ・アーノルド・ネットワークがロケットにもたらす意義とは何だろうか。火炎面はロケット燃焼室の内部にも薄く形成される。この薄い層を正確に捉えてこそ、熱や圧力を正しく予測できる。パラメータが少なければ計算は軽くなる。軽量なモデルはリアルタイム計算に適している。そのため、この構造はリアルタイム診断の候補として注目を集めている。

パラメータが少ないという言葉の重みを考えてみよう。パラメータとはモデルが調整する数値の個数である。この数値が多いと、学習により多くのデータが必要となる。計算も重くなり、メモリも大量に消費する。少数のパラメータで同じ処理を行えるならば、多方面でメリットがある。ロケットに搭載する小型コンピュータ上でも動作させることができる。

限界も併せて見極める必要がある。これらの実例は比較的一般的な単純な反応系で検証されたものだ。化学種が数十種類に増えると、結合線が爆発的に増加する。そうなるとメモリ消費量と学習時間が大幅に増大する可能性がある。このため、構造をより軽量化する研究が進められている。ロケットの高圧乱流燃焼ははるかに複雑である。この構造を実際のエンジン設計に適用するには、まだ多くの課題が残されている。公開コードや比較実験、独立した検証がさらに必要である。現時点では有望な候補構造として扱うのが妥当である。

8.5 関数を関数へと変換するフーリエ・ニューラル・オペレータ

8.5.1 オペレータ学習の原理とグリッド非依存性

オペレータとは、関数から関数へと対応付ける規則である。表現が難しいため具体例に置き換えてみよう。燃焼室入口の流量分布を入力したとする。すると、燃焼室全体の温度分布が出力される。この入口の分布図を全体の温度分布図へと変換する規則がオペレータである。

関数と関数のマッピングを料理に例えてみよう。材料リストの全体を入力すると、完成した料理の写真が出力されると仮定する。材料を少し変えれば、料理も連動して変化する。オペレータ学習はこの全体的な変換を学習する。材料一つひとつの個別値ではなく、全体の関係性を習得する。そのため、条件が変化しても迅速に解

を導き出すことができる。

通常のニューラルネットワークはいくつかの数値を別のいくつかの数値へと変換する。一方、オペレータ学習は1枚の分布図を別の1枚の分布図へと変換する。そのため、流れ場全体を一括して扱うことができる。この発想をいち早く拡張した研究としてDeepONetがある。フーリエ・ニューラル・オペレータも、このオペレータ学習に属する手法である。

この違いがなぜ大きいのかを確認してみよう。条件が変わるたびに計算をやり直しては遅い。オペレータを一度学習してしまえば、多様な条件に対して迅速に応答できる。入口条件が変化しても、再学習を行う必要はない。設計現場では条件を幾度となく変更して検討を行う。だからこそ、オペレータ学習が設計ツールとして注目されているのである。

フーリエ・ニューラル・オペレータの核心はフーリエ変換にある。フーリエ変換は複雑な形状を複数の波の重ね合わせへと変換する技術である。低周波の波は流れの大局的な構造を捉える。高周波の波は細かな模様のような微細構造を捉える。このニューラルネットワークは主に低周波成分を学習し、全体の大きな流れを素早く描写する。

この方式には相応の利点がある。ニューラルネットワークが流れを波の重ね合わせとして扱う点だ。大きな流れは少数の低周波成分に要約して素早く捉える。広範な領域の関係性を一度に把握するのに有利である。ただし、この手法は方程式の微分を直接解く数値解析手法ではない。低周波成分のみを残して高周波成分を切り捨てれば計算は軽くなる。しかし、その切り捨てによって衝撃波や火炎面のような急峻な部分がむしろ不鮮明になってしまう恐れがある。したがって、微細構造が重要となる領域では注意が必要である。

この不鮮明さを写真に例えてみよう。ピントがずれた写真は輪郭がぼやける。シャープな線がにじんで見える。高周波成分を多く切り捨てるほど、このようににじみが生じる。火炎の鋭い境界が潰れてしまう可能性がある。そのため、こうした領域では高周波成分を維持するための個別の処理が求められる。

この手法において際立った性質がグリッド非依存性である。このモデルは計算グリッドの解像度に関係なく定義される。低解像度のデータで学習させた後、より細かなグリッドへ適用することができる。これをゼロショット超解像と呼ぶ。低解像度の写真を高解像度に復元する作業に似ている。ただし、これは理論的な性質および特定の実験で示された結果である。新たな解像度において精度が自動的に保証されるわけではない。

通常のニューラルネットワークではこのような処理は行えない。入力と出力のサイズが最初から固定されているためだ。グリッドを変更すれば、モデルを一から作り直さなければならない。フーリエ・ニューラル・オペレータは異なる。流れをグリッドではなく関数として扱う。そのため、解像度が変わっても同一のモデルを使用できる。

フーリエ変換をラジオに例えてみよう。ラジオは複数の放送を周波数ごとに選局して受信する。低周波と高周波はそれぞれ異なる情報を担っている。フーリエ・ニューラル・オペレータも同様に流れを周波数へと分解する。大きな流れは低周波に、細かな模様は高周波に含まれる。このニューラルネットワークは低周波側を選択し、大局的な流れを素早く把握する。

グリッド非依存性がロケット計算にもたらす利点は大きい。開発初期には粗いグリッドを用いて迅速に複数の設計案を検討する。有望な案を選定した上で、細かなグリッドによって高精度に検証を行う。この際、モデルを再学習させる必要はない。同一のモデルを双方の解像度でそのまま利用できるため、時間とコストの双方が削減される。

ただし、すべての問題において自動的に適用できるわけではない。衝撃波のように値が不連続に変化する領域では困難が伴う。薄い火炎面や壁面近傍の乱流場についても注意が必要である。こうした領域では高周波情報が極めて重要となる。個別の処理と厳密な検証が伴って初めて信頼性が確保される。

8.5.2 燃焼流動のためのニューラル・オペレータ

燃焼は熱、流動、化学反応が複雑に絡み合う難度の高い問題である。この問題に対してニューラル・オペレータを適用しようとする研究が続けられている。複数の研究チームがそれぞれ異なるアプローチを試みている。ここでは検証済みの最新事例を概念中心に見ていく。

一つの方向性は、スティフな化学反応をオペレータとして学習する道である。拡張フーリエ・ニューラル・オペレータ（EFNO）がその一例だ。著者はウォン、リー、チャン、チェン、ジョウである。この研究は、未学習の条件下でもスティフな化学反応を解くことを目指した。0次元の水素自然発火および3次元の水素・アンモニア噴流火炎において試験が行われた。未学習の状態に対しても良好に汎化する性質を示した。この拡張オペレータに関する研究は、学術誌『Combustion and Flame』に掲載された。

自然発火という言葉の解き明かしてみよう。燃料と酸素を高温の環境に置くと、自然に火がつく。マッチがなくても自ら燃え上がる現象である。この瞬間の化学反応は非常に速く、スティフ性が高い。拡張演算子はこの困難な瞬間を学習しようとした。スティフ化学のテストケースとして頻繁に用いられる問題である。

拡張演算子なぜ重要なのかを確認しておこう。通常のニューラルネットワークは、学習した条件下でのみ良好に適合する。温度や圧力が少し外れただけでも予測が狂ってしまう。拡張演算子はこの障壁を低くしようとした。実験において学習していない条件まで、ある程度一般化した。新たなロケットの条件下でも活用できる余地を示したと言える。

もう一つの方向性は、三次元反応乱流を丸ごと学習する道である。ある研究では、U-Net構造を追加したフーリエニューラル演算子でこれを扱った。U-Netは大局と詳細を同時に扱うニューラルネットワーク構造である。圧縮性反応乱流の速度、温度、密度の周波数特性を良好に再現した。従来の計算よりもはるかに高速に流れを予測した。こうした結果はサロゲートモデルの可能性を示している。この系統の研究は、まだ査読前の初期段階のものが多い。

周波数特性を良好に合わせるという意味も解き明かしてみよう。流れには大きな渦と小さな渦が混ざり合っている。それぞれの大きさの渦が保持するエネルギーがある。このエネルギー分布を正確に描けるかどうか重要な指標となる。大きな流れだけが合っていて小さな渦を見逃してしまえば、片手落ちである。優れた演算子は、大きな流れと小さな渦のこの分布を広範に再現する。

第三の方向性は、放射熱伝達を演算子で扱う道である。高温の火炎は光の形でも熱を失う。これを放射熱伝達と呼ぶ。Zhaoらは火災の放射熱伝達を解くニューラル演算子を提案した。この研究はロケットではなく火災を対象とした初期の研究である。そのため、ロケットの実証へと拡張して適用することはせず、隣接する事例としてのみ参考にする。

放射熱伝達を焚き火にたとえて感じてみよう。焚き火の前に立つと顔が熱くなる。空気が温まる前に、光が先に熱を運ぶからである。ロケット燃焼室内の火炎も、このように光によって熱を放出する。この放射が壁面を温め、火炎を冷却する。したがって、正確な予測を行うには、この放射熱まで含める必要がある。

放射を計算に組み込むのは極めて厄介である。光は四方八方に広がり、互いに混ざり合う。方向ごとに強度も異なる。この複雑な流れを演算子で学習しようとする試みが、火災研究から生まれた。ロケットへと移植するには条件を再調整して検証しなければならない。それでも今後の方向性を示す有意義な初期事例である。

これらの事例は共通の利点を示している。高精度な計算結果を学習すれば、高速なサロゲートモデルとなる。低解像度の計算を高解像度の形態へと復元することができる。センサーが少ない状況において全場を推定する補助ツールとなる。設計空間を短時間で探索するために活用できる。

演算子学習が物理情報学習と出会う接点もある。ニューラル演算子は高速であるが、常に物理法則を守るわけではない。ここに保存則の制約を損失関数として課すことができる。演算子の速度と物理の信頼性を同時に得ようとする試みである。この融合は、後の回転デトネーションの事例で再び登場する。そのため、これら二つのツールは互いに競合するのではなく、対をなすパートナーとなる。

ここで、これらの事例をどのように読み解くべきかを確認しておく。本書は特定のモデルの性能比較表を掲載していない。初期研究における数値は、条件によって大きく変動するためである。代わりに、検証された事例

を通じてニューラル演算子が果たす役割を説明する。数値よりも手法の適用性に重きを置いている。

大規模計算の事例も登場している。DeepFlameの研究チームは、ニューラルネットワークを導入して超臨界燃焼を大規模に解いた。著者はGuo、Mao、Liu、Tan、Jia、Chenである。公開資料によると、メタンと酸素の乱流燃焼を数百億セル規模で計算した。これは従来の計算能力を大きく超えた範囲である。100個を超えるインジェクタを備えたロケット燃焼に向けた初期研究である。

実際の設計に用いるには、多くの検査項目が存在する。質量とエネルギーの保存則が守られているか確認しなければならない。衝撃波の位置が正確であることを確かめる必要がある。化学種の濃度が負の値に落ち込んでいないかを注視しなければならない。こうした検証を通過して初めて実用的なツールとなる。サロゲートモデルは精密な計算を支援するパートナーであり、代替物ではない。

8.6 回転デトネーションエンジンの衝撃波燃焼界面復元

8.6.1 回転デトネーションエンジン解析の課題

回転デトネーションエンジン（RDRE）は、環状の燃焼室を用いる。その内部をデトネーション波が円を描きながら高速で回転する。デトネーションとは、衝撃波と燃焼が一体となって連動する爆発的な燃焼現象である。この波動は音速の何倍もの速さである秒速数千メートルで伝播する。

この方式は、燃焼そのものが圧力を高めるという利点を持つ。通常のエンジンは圧縮機やポンプで圧力を高めた後に燃焼させる。デトネーションは、衝撃波が気体を瞬時に圧縮しながら燃焼させる。そのため、燃焼中に圧力が自発的に上昇する。これを圧力上昇燃焼と呼ぶ。ただし、燃料と酸素を供給する噴射圧力は依然として必要である。燃焼器の内部で圧力が上昇しても、噴射や混合、排気において損失が生じる。したがって、エンジン全体としての利得は条件によって異なる。適切に活用すれば効率が向上する可能性があるため、世界各国の多くの機関が開発に乗り出している。

デトネーションと通常の燃焼との違いを確認してみよう。通常の燃焼は火がゆっくりと広がるように伝播する。デトネーションは衝撃波を先頭に立てて爆発的に伝播する。衝撃波は気体を一瞬で圧縮して加熱する。その直後で燃料が直ちに燃焼する。衝撃波と火炎が密着しているこの構造が、強大な圧力を生み出す。

問題は、内部が極めて複雑である点である。先頭の衝撃波と発熱反応帯が互いに密着している。斜め衝撃波や接触面、未燃混合層が複雑に絡み合う。これらの構造が100万分の1秒単位で相互作用する。そのため、流体力学において屈指の難問に挙げられる。

この相互作用を道路上の事故にたとえてみよう。複数の車が狭い交差点で同時に絡み合う。一箇所の変化が一瞬にして全体へと波及する。デトネーションの内部でも、衝撃波と火炎がこのように絡み合っている。小さな揺らぎが波動全体を変化させてしまう。そのため、このエンジンの内部を予測し制御することは困難を極める。

計測はさらに困難である。地上試験で観測できるものは限られている。燃焼室の外壁における圧力信号程度がすべてである。超高速カメラで火炎の光を撮影することもある。この光を自発光と呼ぶ。特定の分子が反応しながら自ら発する光である。しかし、このような計測だけでは内部の三次元状態を直接知ることはいできない。

回転デトネーションエンジンをなぜ開発するのかについても理解しておこう。通常のロケットエンジンは一定の圧力下で燃料を燃焼させる。デトネーション燃焼は圧力を自ら高めながら燃焼させる。同じ燃料でより大きな推力を得られる可能性がある。エンジンをより短く、軽量に設計できる余地も生まれる。そのため、この方式が次世代推進技術の有力候補として挙げられている。

このエンジンの難しさをカメラにたとえてみよう。高速で回転するコマの写真を撮るとする。シャッター速度が遅いと、コマはブレて不鮮明になる。デトネーション波はコマよりもはるかに高速である。どれほど高速なカメラであっても外観を捉えることしかできない。内部を見通すには、欠落した部分を計算によって補わなければならない。

デトネーション波の速度を数値で実感してみよう。この波は秒速数千メートルで伝播する。銃弾よりも速い速度である。環状の燃焼室を1周するのに1ミリ秒もかからない。そのわずかな時間の中で圧力と温度が激しく乱高下する。その変化はあまりに急速であり、人間の目では到底追いつくことができない。

したがって、復元モデルが切実に求められる。まばらな計測データから流れ場全体を復元するツールが必要となる。圧力、温度、速度、化学種分布を短時間で推定しなければならない。この部分こそが、物理情報学習と演算子学習が出会う場所である。本章で学んだ手法がここで力を合わせる。

8.6.2 データと物理を融合した復元とデジタルツイン

復元の第一のツールは超解像技術である。まばらで粗い計測を詳細な場へと復元する。YaoとZhangの2026年の研究は、循環一貫性敵対的生成ネットワークを用いてこれを試みた。敵対的生成ネットワークは、生成側と識別側が競い合いながら学習する構造である。偽造犯と鑑定士が互いを鍛え合う姿に似ている。この手法は水素と空気のエンジン計算データを用いて学習を行った。粗い流れ場を8倍詳細に復元して見せた。この結果は学術誌に掲載された研究である。

超解像がなぜ必要なのかをイメージで捉えてみよう。古い写真を拡大すると階段状に粗くなる。超解像技術はこの粗い写真を滑らかに蘇らせる。燃焼計算においても粗い格子による結果が出力される。この粗い場を詳細な場へと復元すれば、情報量が増加する。粗い計算によって計算コストを抑えつつ、詳細を取り戻す道である。

次のツールは多忠実度融合である。低コストの低精度計算と高コストの高精度計算を組み合わせる。少量の高精度データからでも正確な推定を得ようとする発想である。Cheap2Richという研究がこれを回転デトネーションエンジンに適用した。著者はBao、Zajac、Powers、Raman、Kurtzである。この多忠実度研究は、まだ査読前の初期研究である。

多忠実度の利点を家計のやりくりにとえてみよう。高価な食材ばかり使っているのは家計が苦しくなる。安価な食材でベースを作り、重要なところにだけ高級な食材を使う。計算も同様である。低精度計算で大枠を捉える。重要な箇所のみを高精度計算で整える。そうして少ないコストで高い精度に迫る手法である。

この融合にはデータ同化という概念も含まれる。データ同化とは、計算と実際の計測値を継続的に整合させていく手法である。天気予報が観測データを受け取って予測を修正することと同じである。回転デトネーションエンジンにおいてもセンサー信号が入力される。この信号を用いて計算を絶えず補正する。そうすることで、モデルの予測が実際のエンジンの状態により近づくことになる。

もう一つのツールは、観測を反映する生成モデルである。生成モデルとは、もっともらしいシーンを自ら生成するニューラルネットワークである。まばらな観測データを条件として与えると、場全体を描き出す。観測位置が変化しても、再学習することなく適用できる余地がある。Wangらは回転デトネーション燃焼器の復元にこのような試みを提案した。そのため、センサーが少なく観測が不十分な状況において有用である。

最後のツールは、ニューラル演算子と物理情報ニューラルネットワークの結合である。ニューラル演算子は場全体を高速に概算する。物理情報ニューラルネットワークは保存則を守るように拘束する。両手法を組み合わせることで、高速でありながら物理法則に則った推定器となる。センサー信号が入力されると、短時間で内部を復元する。

この復元結果はデジタルツインへとつながる。デジタルツインとは、実機の状態をコンピュータモデルが追従する技術である。復元された流れ場から、壁面熱負荷や燃焼効率を計算できる。インジェクタが熱によって損耗する危険性を事前に察知することができる。燃焼不安定性を短時間で抑制する制御にも結びつく。

燃焼不安定性をブランコにとえてみよう。ブランコをタイミングに合わせて押すと、次第に揺れが大きくなる。燃焼室内の圧力振動も、火炎とタイミングが一致すると増大する。この振動が大きくなると、エンジンが破損する恐れがある。そのため、振動を迅速に察知し、その同期を断ち切らなければならない。リアルタイムの復元と制御が、この振動を感知して抑制する役割を担う。

ただし、ここでも留意すべき点が多い。これらの復元研究の多くは初期段階にある。大幅な速度向上や高精度を謳う数値は、前提条件に左右される。そのため、本書ではそのような数値を本文には記載しない。この部分については、設計概念と検証済みの事例のみで説明する。

デジタルツインがなぜ有用であるかを見てみよう。試験中の実際のエンジン内部を直接視認することはできない。デジタルツインはセンサー信号から内部の状態を推測する。危険な兆候を人間よりも迅速に察知する。問題が深刻化する前に警告を発することができる。再使用ロケットにおいて、この早期警告は極めて価値が高い。

自己更新には隠れたリスクも存在する。モデルが自身の予測に基づいて自身を更新すると、誤差が累積する恐れがある。誤った方向へと自己を駆動させてしまう可能性がある。2026年のある研究はこの問題を指摘した。物理によって安定化した自己更新型デジタルツインを提案した。この研究はロケットではなく一般的な熱問題を用いて概念実証を行った。物理法則が更新の手綱を握る仕組みである。

制限器がなぜ必要なのかを確認しておこう。人工知能は時折、突拍子もない値を出力することがある。その値がそのまま制御系に入力されると危険である。制限器は値が安全範囲を超えないように防止する。人間が定めた物理的限界を守る防護柵である。自律制御にはこのような防護柵が不可欠である。

実際のエンジン制御に適用するには、さらなる準備が必要である。高速試験データが十分に蓄積されなければならない。独立した検証が伴わなければならない。安全を担保する制限器も備えなければならない。こうした動向は、本技術がまだ発展途上にあることを示している。それでも進むべき方向性は明確である。データと物理法則を融合させた復元技術が定着しつつある。

まとめ

本章は燃焼計算に人工知能を取り入れるさまざまな道筋を扱った。出発点は一つの問題であった。ロケット燃焼は高速な化学反応と低速な流れが絡み合い、計算量が多い。従来の計算は正確だが遅い。人工知能は高速だが、物理に反すれば危険である。

その答えが物理情報機械学習である。ニューラルネットワークはデータのみを模倣するのではない。質量やエネルギーの保存といった法則をともに守る。物理情報ニューラルネットワークがその代表的な手法である。データが少なくても物理が空白を埋めてくれる。逆問題を解く際にこの力が大きく発揮される。

ここで人工知能と物理の関係を整理しておこう。人工知能はデータから規則を見つけ出すことに長けている。物理は長く検証された法則を含んでいる。どちらか一方だけでは不十分である。データだけを用いれば物理に反する。物理だけを用いれば計算量が多い。そのため、この二つを併用することが本章全体の核心である。

スティッフ問題では、物理をより強く課さなければならない。ペナルティだけでは不十分な場合が多い。時間積分器をニューラルネットワークに組み込んで安定性を得る。保存を強制する射影によって、不合理な値を防ぐ。CRK-PINNは物理を損失として課すソフト制約の事例である。

多成分反応流の方程式も改めて確認しておこう。質量、運動量、化学種、エネルギーという四つのバランスが骨格である。このバランスは、いかなるものも理由なく生成したり消滅したりしないという規則である。物理情報学習はこの規則を損失関数に組み込む。自動微分によって方程式の残差を正確に測定する。そのおかげで、疎なデータからでも全体を再現できる。

コルモゴロフ・アーノルド・ネットワークは新たな構造を提示する。結合線の上に柔軟な関数を配置する。急峻な火炎面をより良く描写できる。ChemKANsが燃焼化学においてこの可能性を示した。少ない値でもノイズに強い結果を出した。

フーリエ神経演算子は関数を関数へと変換する。低解像度で学習し、高解像度で利用できる。高速なサロゲートモデルや復元ツールとなる。拡張演算子とU-Netの結合研究が反応流において成果を示した。放射熱伝達を扱う演算子の研究も隣接分野から登場した。ただし、衝撃波や薄い火炎面は依然として注意が必要である。

回転 detonation エンジン、これらの手法が集まる舞台である。疎な計測から内部を再現する復元が目標である。超解像とマルチフィデリティ、演算子と物理ニューラルネットワークの結合が用いられる。その結果はデジタルツインやリアルタイム制御へとつながる。まだ初期段階であり、さらなる検証が必要である。

本章の手法を一文でまとめてみよう。すべて物理とデータを併用する道である。物理は信頼を与え、データは速度を与える。どちらか一方だけではロケット燃焼を扱うことは難しい。二つの力が交わる場所に答えがある。本書はその場所を検証された事例によって示した。

本章で用いた事例の性質も整理しておこう。ライシの物理情報ニューラルネットワークとリーのフーリエ神経演算子は、広く引用される基礎研究である。CRK-PINNとChemKANsは査読を経た学術誌論文である。DeepFlameと拡張演算子、マルチフィデリティ復元は最新の研究である。このうちの相当数はまだ初期段階のプレプリントである。初期研究は、今後変更される余地があることを意味する。

本章を貫く姿勢も振り返る価値がある。本書は根拠を優先して事例を選んだ。名前だけがもっともらしいモデルは概念へと格下げした。確認されていない性能数値は本文に入れなかった。初期研究は初期研究であると明確に記した。読者が事実と期待を区別できるように手助けするためである。

今後の課題も明確である。幅広い条件下で一度にうまく適合するモデルが必要である。衝撃波や薄い火炎面を安定して扱わなければならない。実際のエンジンデータで検証した事例がさらに蓄積される必要がある。安全を守るリミッターもともに発展しなければならない。これらの課題が解決されるほど、ツールは現場へと近づいていく。

本章がもたらす教訓は明白である。人工知能は燃焼計算の速度を大きく変える。しかし、物理と検証が伴ってこそ初めて信頼できる。華やかなモデル名よりも確認された根拠が重要である。このバランスの上で次世代推進技術が一步步育っていく。人工知能と物理が手を携えるとき、その歩みは強固なものとなる。

関連根拠資料

- Raissi, M., Perdikaris, P., & Karniadakis, G. E. (2019). Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations. *Journal of Computational Physics*, 378, 686-707. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2018.10.045>
- Karniadakis, G. E., Kevrekidis, I. G., Lu, L., Perdikaris, P., Wang, S., & Yang, L. (2021). Physics-informed machine learning. *Nature Reviews Physics*, 3, 422-440. <https://doi.org/10.1038/s42254-021-00314-5>
- Li, Z., Kovachki, N., Azizzadenesheli, K., Liu, B., Bhattacharya, K., Stuart, A., & Anandkumar, A. (2021). Fourier Neural Operator for Parametric Partial Differential Equations. *International Conference on Learning Representations*. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2010.08895>
- Kovachki, N., Li, Z., Liu, B., Azizzadenesheli, K., Bhattacharya, K., Stuart, A., & Anandkumar, A. (2023). Neural Operator: Learning Maps Between Function Spaces With Applications to PDEs. *Journal of Machine Learning Research*, 24, 1-97. <https://www.jmlr.org/papers/v24/21-1524.html>
- Lu, L., Jin, P., Pang, G., Zhang, Z., & Karniadakis, G. E. (2021). Learning nonlinear operators via DeepONet based on the universal approximation theorem of operators. *Nature Machine Intelligence*, 3, 218-229. <https://doi.org/10.1038/s42256-021-00302-5>
- Lu, L., Meng, X., Mao, Z., & Karniadakis, G. E. (2021). DeepXDE: A deep learning library for solving differential equations. *SIAM Review*, 63(1), 208-228. <https://doi.org/10.1137/19M1274067>
- Liu, Z., Wang, Y., Vaidya, S., Ruehle, F., Halverson, J., Soljagic, M., Hou, T. Y., & Tegmark, M. (2025). KAN: Kolmogorov-Arnold Networks. *International Conference on Learning Representations*. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2404.19756>
- Ji, W., Qiu, W., Shi, Z., Pan, S., & Deng, S. (2021). Stiff-PINN: Physics-Informed Neural Network for Stiff Chemical Kinetics. *The Journal of Physical Chemistry A*, 125(36), 8098-8106. <https://doi.org/10.1021/acs.jpca.1c05102>
- Zhang, S., Zhang, C., & Wang, B. (2024). CRK-PINN: A physics-informed neural network for solving combustion reaction kinetics ordinary differential equations. *Combustion and Flame*, 269, 113647. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2024.113647>
- Koenig, B. C., Kim, S., & Deng, S. (2025). ChemKANs for combustion chemistry modeling and acceleration. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 27(33), 17313-17330. <https://doi.org/10.1039/D5CP02009C>
- Koenig, B. C., & Deng, S. (2025). Kolmogorov-Arnold Chemical Reaction Neural Networks for learning pressure-dependent kinetic rate laws. *arXiv preprint(査読前のプレプリント)*. [arXiv:2511.07686](https://arxiv.org/abs/2511.07686). <https://arxiv.org/abs/2511.07686>
- Weng, Y., Li, H., Zhang, H., Chen, Z. X., & Zhou, D. (2025). Extended Fourier Neural Operators to learn stiff chemical kinetics under unseen conditions. *Combustion and Flame*, 272, 113847. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2024.113847>

- Wu, J., Wang, X., Zhang, G., Liu, J., Li, X., Zhang, Y., Zhang, H., Lyu, J., Wang, B., & Wu, Y. (2025). Physics-informed machine learning for combustion: A review. arXiv preprint(査読前のプレプリント). arXiv:2509.03347. <https://arxiv.org/abs/2509.03347>
- Zhang, Z., Li, Z., Wang, Y., Yang, H., Peng, W., Teng, J., & Wang, J. (2026). Prediction of three-dimensional chemically reacting compressible turbulence based on implicit U-Net enhanced Fourier neural operator. *Acta Mechanica Sinica*, 42(7), 725274. <https://doi.org/10.1007/s10409-025-25274-x>
- Guo, Z., Mao, R., Liu, L., Tan, G., Jia, W., & Chen, Z. X. (2025). Deep Learning-Enabled Supercritical Flame Simulation at Detailed Chemistry and Real-Fluid Accuracy Towards Trillion-Cell Scale. *Proceedings of the International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC25)*. arXiv:2508.18969. <https://doi.org/10.1145/3712285.3759850>
- DeepModeling. (2026). DeepFlame development repository. <https://github.com/deepmodeling/deepflame-dev>
- Jiao, A., Jiang, W., Lu, X., Wang, Y., & Lu, L. (2026). Nested Fourier-enhanced neural operator for efficient modeling of radiation transfer in fires. arXiv preprint(査読前のプレプリント). arXiv:2604.13919. <https://arxiv.org/abs/2604.13919>
- Bao, Y., Zajac, J., Powers, M., Raman, V., & Kutz, J. N. (2026). Cheap2Rich: A Multi-Fidelity Framework for Data Assimilation and System Identification of Multiscale Physics -- Rotating Detonation Engines. arXiv preprint(査読前のプレプリント). arXiv:2601.20295. <https://arxiv.org/abs/2601.20295>
- Yao, S., & Zhang, W. (2026). Super-resolution reconstruction of high-fidelity rotating detonation flow fields based on cycle-consistent generative adversarial networks. *Physics of Fluids*, 38(4), 041704. <https://doi.org/10.1063/5.0333031>
- Wang, X., Li, Z., Zhang, Y., Wen, H., & Wang, B. (2025). Observation-guided generative flow field reconstruction of rotating detonation combustor. *Physics of Fluids*, 37(11), 116110. <https://doi.org/10.1063/5.0300394>
- Karkadakattil, A. (2026). A Physics-Stabilized Self-Updating Digital Twin Framework Using Physics-Informed Neural Networks for Thermal Field Prediction. *Applied Computer Systems*, 31(1), 30-40. <https://doi.org/10.2478/acss-2026-0003>
- Shateri, A., Yang, Z., Yan, Y., Paul, M. C., & Xie, J. (2026). AI-Powered Surrogate Modelling for Multiscale Combustion: A Critical Review and Opportunities. arXiv preprint(査読前のプレプリント). arXiv:2604.25617. <https://arxiv.org/abs/2604.25617>
- Mousavi, M., Caldwell, C., Baltes, J., Aljaseem, M., & Lee, B. J. (2025). Physics-Informed Neural Networks in Clean Combustion: A Pathway to Sustainable Aerospace Propulsion. arXiv preprint(査読前のプレプリント). arXiv:2509.08094. <https://arxiv.org/abs/2509.08094>
- Poinsot, T., & Veynante, D. (2012). *Theoretical and Numerical Combustion* (3rd ed.). R.T. Edwards, Inc., Philadelphia, PA.

第9章 再生冷却流路、フィルム冷却孔およびインデューサのトポロジー逆設計最適化

はじめに

夏に熱い鍋を手で掴むと火傷をする。そのため、私たちは鍋の取っ手を木やプラスチックで作る。熱が手まで伝わらないように防ぐためである。ロケットエンジンも同じ悩みを抱えている。エンジンの内側では燃料が燃焼しながら極めて高温のガスが生成される。このガスは金属をも溶かすほど熱い。しかし、その高温ガスを閉じ込める壁は金属でできている。この壁をどのように守るかが、ロケットエンジン設計における大きな課題である。

ロケットはこの問題を機巧に解決する。エンジンへと送り込まれる燃料をすぐには燃やさない。まず高温の壁の中に設けられた細い流路へと流し込む。燃料は壁を通過しながら壁の熱を奪う。壁は冷やされ、燃料は温められる。温められた燃料は、その後に燃焼室へと入って燃焼する。壁を守りつつ燃料も予熱する方法である。これを再生冷却 (regenerative cooling) と呼ぶ。温まった燃料を捨てずに再利用することから「再生」という名が付いた。

再生冷却は歴史の長い手法である。初期のロケットからこの手法が用いられてきた。しかし、冷却流路を自由に設計することは困難であった。金属を切削加工して作る方式が、流路の形状を制約していたためである。近年、2つの要素がこの制約を解き放った。1つは金属3Dプリンティングである。もう1つは、優れた設計を素早く見つけ出す人工知能である。この2つが出会うことで、冷却設計は新たな局面を迎えた。

本章ではロケットエンジンの熱管理構造を扱う。壁内部の冷却流路と、壁面に薄い冷却被膜を形成するフィルム冷却孔を取り上げる。燃料を押し上げるポンプの前置羽根であるインデューサ (inducer) も併せて扱う。これら3つの構造はいずれも熱と流れのバランスの問題である。壁をより強く冷却しようとするれば、流れを妨げる抵抗が大きくなる。抵抗を減らそうとするれば、冷却効果が弱まる。このバランスポイントを人間の手作業だけで見出すことは困難である。

ここに人工知能が登場する。本章で扱う人工知能は、絵を描いたり文章を書いたりする人工知能ではない。複雑な設計空間において優れた解を迅速に見つけ出してくれるツールである。ある人工知能は時間のかかる流動計算を肩代わりする。ある人工知能は次にどのような実験を行うべきかを自ら選定する。ある人工知能は複雑な冷却流路の形状を小さな数値の集合へと次元削減する。本章では、それらのツールを1つずつ分かりやすく解説する。

本章の内容がなぜ重要であるかを整理しておこう。ロケットエンジンにおいてトラブルが頻発する箇所が熱管理とポンプである。壁が溶損したりポンプが振動したりすれば、エンジンは停止する。そのため、エンジンを新規開発するにはこの部分に多くの時間と費用が投じられる。設計を少しでも迅速に、少しでも安全に行うことができれば、大きな助けとなる。人工知能はまさにこの場面で力を発揮する。広大な設計空間を人間よりも素早く走査し、優れた候補を選定してくれる。

あらかじめ1点断っておくべきことがある。ロケットエンジンの冷却設計は安全マージンが極めて重視される分野である。壁が一度でも溶ければ、エンジン全体が破壊される。そのため、人工知能が提示した解をそのまま盲信して採用することはない。人工知能は優れた候補を素早く探索するために用いられる。最終的な判断は常に高精度な計算と実際の燃焼試験によって検証される。本章の事例も、その原則を踏まえて読み進める必要がある。

9.1 ロケットが高温の燃焼室壁を守る方法

本節で扱うのは、ロケットエンジンが高温の壁をどのように守っているかである。まず、なぜロケットの燃焼室がそれほどまでに高温になるのかを確認する。次に、再生冷却とは何か、なぜ製造が難しかったのかを説明する。最後に、金属3Dプリンティングがこの設計をどのように変革しつつあるかを見る。本節は、以降に登場

するすべての内容の基礎となる。

ロケットエンジンの主燃焼室の内部では、燃料と酸素が会って燃焼する。このとき生成されるガスの温度は3000度を優に超える。鋼の融点は約1500度である。燃焼ガスは鋼の融点よりもはるかに高温である。さらに燃焼室の内部は圧力も高い。高性能エンジンでは内部の圧力が大気圧の100倍を超える。高温高压のガスが、薄い金属壁を内側から押し広げながら加熱する。

圧力が高いことも大きな負担である。燃焼室内部の高压は薄い壁を外側へと押し出す。風船を強く膨らませると皮膜が張り詰めるのと同じである。ここに、内側は熱く外側は冷たいという大きな温度差が重なる。熱い側は膨張しようとし、冷たい側は元のままとどまろうとする。このせめぎ合いが壁に大きな応力を生じさせる。圧力と熱が一体となって壁を痛めつけるわけである。したがって、壁は薄くありながらも効率よく冷却され、かつ強固でなければならない。

壁へと注ぎ込まれる熱が最大となる位置はノズルスロットである。ノズルはガスを後方へ噴射して推力を生み出すラッパ状の部品である。そのラッパにおいて幅が狭まりくびれている部分をノズルスロット（throat）と呼ぶ。この場所でガスは音速にまで加速する。ガス自体の温度はノズルを通過するにつれてむしろわずかに低下する。それにもかかわらず、ノズルスロットでは壁へと流入する熱が最大となる。高速のガスが狭い壁を激しく擦過するためである。単位面積当たりに壁へと流入する熱量を熱流束（heat flux）と呼ぶ。ノズルスロットの熱流束は極めて大きい。手のひらほどの狭い面積に、大型の強力ストーブ数十台分の熱が集中するようなものである。

熱流束がどれほど大きいか見当をつけてみよう。家庭用ガスコンロのバーナー1口が出す熱は手のひらほどの面積に広がる。ノズルスロットでは、同等の面積にバーナー数十口分の熱が集中する。その熱が薄い金属壁1枚に注ぎ込まれる。壁の内側面と外側面の温度差は数百度に達する。この大きな温度差が金属を歪ませ、亀裂を引き起こす。壁を冷却できなければ、わずか数秒で壁は崩壊する。

この熱を壁がそのまま受け止めれば、壁は溶損するか脆弱化する。そのため再生冷却を用いる。壁の中に細い流路を多数設ける。燃料をこの流路にまず流し込む。燃料が流路を通過しながら壁の熱を奪う。壁は冷やされ、燃料は温められる。温まった燃料は燃焼室へと入って燃焼する。壁を守りながら燃料も予熱するため、熱を無駄にしない。ここにフィルム冷却を組み合わせることもある。フィルム冷却は、壁面に沿って薄い冷却流体の被膜を形成する手法である。2つの手法を併用することで、壁をより安全に保護できる。

問題は、この冷却流路を製造することである。かつては金属の塊を切削して流路を形成していた。切削加工による方式では、流路の形状を単純なものにするしかなかった。大抵は直線状の四角い溝を並行に掘る形であった。このような流路では、位置によって幅や方向を大きく変えることが難しい。熱が過度に集中するノズルスロットだけを個別に強く冷却することは困難である。流路を無理に狭めれば燃料が通過しにくくなり、圧力損失が増大する。圧力損失が大きければ、燃料を圧送するポンプがより大きな動力を出さなければならない。

金属3Dプリンティングがこの限界を打ち破りつつある。金属3Dプリンティングは、金属粉末を薄く敷き詰めてレーザーで溶融結合させる方式である。層を1層ずつ積み重ねて部品を造形する。この方式を用いれば、切削では作れない複雑な内部流路を形成できる。流路を木の枝のように分岐させてから再び合流させる設計も可能である。壁の曲面に沿って湾曲する流路を作ることもできる。熱が集中する箇所には流路を密に、そうでない箇所には疎に配置することができる。設計の自由度が大幅に広がった。

3Dプリンティングが冷却流路をどれほど変革するか、例を挙げてみよう。従来の手法では、内壁に溝を掘り、外側にジャケットを被せることで流路を形成していた。複数の部品を製作して接合する必要があった。継ぎ目が多いと、その部分が弱点になりかねない。3Dプリンティングは、流路が造形された壁を単一の一体構造として造形する。継ぎ目が減るため壁が頑丈になる。製造工程も削減され、時間と材料を節約できる。そのため、設計を何度も修正して試験することが容易になった。

冷却流路用の材料も併せて進歩した。アメリカ航空宇宙局（NASA）はGRCop-42という銅合金を開発した。銅は熱伝導性に優れた金属である。GRCop-42は銅にクロムとニオブをごく少量添加した合金である。優れた熱伝導性を維持しながら、高温環境にも十分に耐えうる。この合金を用いれば、3Dプリンティングによって流路

が組み込まれた燃焼室を一体造形することができる。NASAはこの合金で製作された燃焼室を用いて実際の燃焼試験まで実施した。この開発と試験結果は公開報告書としてまとめられている。NASAはこの材料と製造技術を次世代推進技術計画の中で発展させた。材料・製造・設計が三位一体となって前進した事例である。

フィルム冷却も併用すれば、壁をより安全に保護することができる。壁に小さな孔を多数穿孔する。その孔から低温の流体を少しずつ流出させる。流出した流体が壁面に沿って薄い膜を形成する。この膜が高温ガスと壁面との間に介在する。再生冷却が壁を内側から冷却するのに対し、フィルム冷却は壁の表面を保護膜で覆う。2つの手法は相互に補完し合う。熱が著しく集中するノズルスロット付近では、両方の手法を重畳して適用することもある。

冷却流路の形状は熱管理性能を大きく左右する。流路が狭く稠密であれば、壁と接触する面積が大きくなる。接触面積が大きければ、より多くの熱を奪うことができる。しかし流路があまりに狭すぎると、燃料が通過しにくくなる。燃料を圧送するためにより大きな力が必要となる。この動力のロスを圧力損失と呼ぶ。圧力損失が大きいと、ポンプをより強力に駆動させなければならない。優れた冷却流路は、壁を十分に冷却しながらも圧力損失を低く維持する。この2つはトレードオフの関係にある。

新しい方式も決して平坦な道ばかりではない。2025年に発表されたある研究は、3DプリンティングによるGRC op-42燃焼室の破損事例を分析した。2021年2月のある燃焼試験において、燃焼室がわずか9秒で破壊された。原因を調査したところ、プリンティング中に作業が一時停止した箇所に問題があった。その位置に微小な空隙が通常よりもはるかに多く発生していたのである。空隙が多いと、その部分の強度が低下する。この事例は、新たな製造方式が品質管理に対していかに敏感であるかを示している。自由な設計を手に入れた代わりに、製造工程をより綿密に管理しなければならない。

広がった設計の自由度は、新たな悩みをももたらす。流路の形状をほぼ無限に変更できるようになると、どのような形状が最適であるかを選択することがかえって難しくなった。人間が手作業でいくつかの形状を描いて計算してみる方式では、広大な設計空間を網羅することはできない。流路1つの流れと熱を高精度に計算するだけでも、コンピュータは長時間を要する。この広大な空間を迅速かつ賢明に探索する役割として人工知能が導入される。次節からその手法を1つずつ見ていく。

9.2 冷却流路内の燃料の急変を予測するサロゲートモデル

本節で扱うのは、冷却流路内の燃料がなぜ予測困難であるかである。冷却剤として用いられるメタンやケロシンは、高圧高温の環境下で物性が劇的に変化する。この変動の激しい流れを計算する高精度解析は計算速度が遅い。そこで、計算を肩代わりする人工知能サロゲートモデルを使用する。ここでは、そのサロゲートモデルの原理と限界について説明する。

ロケットの冷却剤としてはメタン（methane）やRP-1が用いられる。RP-1はロケット用に高度に精製されたケロシン（灯油）である。私たちが日常で使う灯油の親戚のようなものである。これらの燃料は冷却流路内で極めて高い圧力を受ける。圧力が一定の値を超えると、液体と気体の境界が曖昧になる。水を例にとると、鍋の中の水が沸騰して気泡が生じるような区別が消失する状態である。この状態を超臨界（supercritical）状態と呼ぶ。超臨界状態の燃料は、液体でも気体でもない中間的な性質を帯びる。

超臨界という言葉は難しく聞こえるかもしれない。分かりやすく解き明かしてみよう。鍋で水を沸騰させると、水が気泡に変わりながら沸き立つ。液体と気体が明確に分かれる。しかし圧力を極めて高くすると、この沸騰現象が消失する。液体が徐々に気体のような性質へと連続的に移行する。気泡が生じる明確な境界がなくなるのである。このように境界が消失した状態が超臨界状態である。冷却流路内の燃料は高い圧力を受けるため、この状態で流動する。

超臨界状態の物性は温度によって急激に変化する。ある温度区間を通過する際、密度が急激に低下する。同じ区間で比熱が突如跳ね上がる。比熱とは温度を1度上昇させるのに必要な熱量である。密度と比熱がこのように乱高下する領域を擬臨界線（pseudo-critical line）と呼ぶ。この付近において、燃料はあたかも沸騰するかのように物性が急変する。実際には沸騰しないものの沸騰と類似しているため、擬似沸騰（pseudo-boiling）と

呼ばれる。

比熱が急上昇することは冷却にとって有利な側面もある。比熱が大きければ、燃料が多くの熱を蓄えることができる。同量の燃料がより多くの熱を抱えて流れていく。しかし密度が急低下すると、燃料が膨張して流速が速くなる。加速した流れが壁面近傍で乱れると、熱を運ぶメカニズムが乱される。有利な点と不利な点が同一の地点で同時に現れる。そのため、この領域における冷却挙動を予測することは極めて難解である。

擬似沸騰は冷却に問題を引き起こす。燃料が壁面から熱を十分に奪ってこそ壁面が冷える。しかし、擬似臨界線付近では熱を奪う能力が急激に低下することもある。壁面近くで温められた燃料層が、まるで薄い掛け布団のように熱を遮るのである。この現象を熱伝達劣化（heat transfer deterioration）と呼ぶ。熱伝達劣化が生じると、その箇所の壁面温度が急上昇する。2020年のある研究は、ロケット燃料を加熱する際に擬似沸騰と熱伝達劣化が同時に現れるとまとめた。2024年の研究は、この劣化がなぜ生じるのかを微細な二状態流動モデルによって掘り下げた。この熱伝達劣化は、後述するコーキング問題ともつながる。壁面が急激に高温になると、その箇所で燃料がより急速に分解されるためである。

このような流れを計算する精密な手法がある。数値流体力学（computational fluid dynamics, CFD）である。流れを小さな格子に細かく分割し、各マスの速度、圧力、温度を物理法則に従って解く。基礎となる法則は三つの保存則である。一つ目は質量保存である。流入した流体と流出した流体の量が一致しなければならない。次は運動量保存である。流体を押したり引いたりする力が速度変化と一致しなければならない。最後はエネルギー保存である。出入りした熱が温度変化と一致しなければならない。この三つの法則をすべてのマスで連立して解くのがCFDである。CFDは正確だが遅い。冷却流路のひと区間を精密に解くだけでも、コンピュータで1時間近くかかることがある。冷却流路の設計では、流路の形状と流量を数千通りに変えながら確認する必要がある。毎回1時間ずつ計算しては設計が終わらない。

そこで代理モデル（surrogate model）を用いる。代理モデルは、遅い計算の代わりとなる高速な近似モデルである。まずCFDで多数のケースを事前に計算してデータを集める。そのデータを用いて人工ニューラルネットワークを学習させる。ニューラルネットワークは流路形状、流量、圧力、入口温度を入力として受け取る。そして壁面温度、熱流束、圧力損失を即座に出力する。ドイツ航空宇宙センター（DLR）の研究チームは、このようなニューラルネットワーク代理モデルを構築した。彼らが実際に使用したのは、隠れ層を数層積み重ねた標準的なニューラルネットワークであった。CFDで1時間かかっていた計算を、このモデルは1秒にも満たない時間で終わらせた。当初は直線流路のみを対象としていたが、その後、湾曲流路まで扱えるよう対象を広げた。

代理モデルを作成する手順は次の通りである。まず設計変数の範囲を決定する。流路幅、流路高さ、流量、入口温度の範囲である。その範囲内から多様なケースを選定してCFDで計算する。計算結果を入力と出力のペアとしてまとめる。これらのペアがニューラルネットワークの教科書となる。ニューラルネットワークはペアを見ながら、入力から出力への規則を学習する。学習が完了すれば、新たな入力に対しても素早く回答する。人間が多数の例題を解きながら問題のパターンを習得することと似ている。

代理モデルの精度を高める方法はほかにもある。これらの方法は前述のDLRの研究がそのまま採用したものではなく、代理モデルを頑健にするために広く用いられる手法である。一つは物理知識を組み込むことである。ニューラルネットワークがデータのみを見て学習すると、物理法則に反する回答を出す可能性がある。そこで、質量・運動量・エネルギーが保存されるという法則を学習規則に組み込む。ニューラルネットワークがその法則に違反するとペナルティを与える。このように構築されたニューラルネットワークを物理情報ニューラルネットワーク（physics-informed neural network, PINN）と呼ぶ。ここに残差接続（residual connection）という構造を追加することもある。残差接続は前層の情報をスキップして後続の層へ直接送る経路である。この構造は、深層ニューラルネットワークを安定して学習させるのに役立つ。こうした手法を冷却流路の代理モデルに適用することは、本書が提案する方向性である。

超臨界流体の物性値も正確に入力しなければならない。米国国立標準技術研究所（NIST）は、多様な流体の密度や比熱といった値を温度および圧力ごとに整理して公開している。メタンのように単一成分の純粋流体は、この標準値をそのまま適用して使用できる。そうしてこそ擬似臨界線付近の急激な変化を見逃さない。しかし

、ケロシンであるRP-1は事情が異なる。RP-1は複数の炭化水素が混ざり合った混合物であるため、精製のたびに成分がわずかに異なる。そのため純粋流体の物性表をそのまま使用することはできず、物性を整合させる代替混合物モデルを別途作成しなければならない。物性値が不正確であれば、代理モデルも見当違いな壁面温度を出力してしまう。超臨界流体は物性が敏感であるため、この基礎データが重要である。

冷却材自体の選定を工夫する研究もある。2026年のある研究は、ロケット用ケロシンを模擬する代替燃料を設計した。超臨界状態における物性を高精度に再現する組み合わせを遺伝的アルゴリズムによって探索した。遺伝的アルゴリズムは、優れた組み合わせを選んで掛け合わせながら解を改善していく手法である。冷却計算に用いる燃料モデルが正確であるほど、予測も高精度になる。人工知能は燃料の組み合わせを選定する作業にも力を貸している。

代理モデルを扱う際には注意すべき点がある。商標のように付けられたモデル名や、検証されていない性能の数値に依存してはならない。そのため本書は、特定のモデル名ではなくCFD代理モデルという一般的な概念で説明する。原理が同じであれば、名称が何であれ学ぶべき内容は同じである。

この代理モデルは実機エンジンにも適用された。ドイツ航空宇宙センターは、独自開発エンジンの冷却流路性能をこの手法で評価した。壁面温度の予測精度を向上させ、設計に反映させた。計算が高速化したことで、多様な流路設計を短時間で比較検討できるようになった。時間のかかる精密計算に縛られることなく、設計空間を幅広く探索できたのである。

代理モデルには明確な限界がある。代理モデルは学習した範囲内でのみ信頼できる。学習時に現れなかった未知の流路形状や未知の運転条件では、大きく外れる可能性がある。超臨界流体は物性が敏感であるため、このリスクはさらに大きくなる。したがって、代理モデルのみで最終設計を決定してはならない。代理モデルによって有望な候補を迅速に絞り込む。その候補のみを選定し、精密なCFDと実際の燃焼試験によって再確認する。代理モデルは答えを代わりに導き出すツールではなく、候補を迅速にスクリーニングするためのツールである。

9.3 少ない計算量でフィルム冷却孔を探索する能動学習

フィルム冷却がなぜ必要なのかから見ていこう。再生冷却は壁面を内側から冷却する。しかし、熱が著しく集中する箇所では、壁面内側の冷却だけでは不十分な場合がある。壁面表面そのものが高温ガスに直接接触して加熱されるためである。そこで表面に薄い保護膜をもう一層被せる。これがフィルム冷却である。再生冷却とフィルム冷却は、内側と外側から壁面を共に保護する。

フィルム冷却 (film cooling) は、高温の壁面の直前に低温流体の薄い膜を形成する手法である。壁面に多数の小さな孔を穿孔する。その孔から低温流体を斜めに噴出させる。噴出された流体は壁面に沿って薄く広がり、掛け布団のように壁面を覆う。この膜が高温ガスと壁面の間を遮断する。壁面は高温ガスに直接触れないため、加熱が抑えられる。自動車のフロントガラスにデフロスターの風を下から上へと吹き付ける様子に似ている。

フィルム冷却の性能はいくつかの値によって決まる。一つは吹き込む流体の強さである。これをブローイング比 (blowing ratio) と呼ぶ。低温流体の流れの強さを高温ガスの流れの強さで割った値である。孔の傾斜角度、孔同士の間隔、孔の形状も性能を決定する。これらの値がわずかに変化するだけでも、膜の性能は大きく変わる。膜が壁面にしっかりと密着するか、あるいは浮き上がって剥がれるかは、これらの値に左右される。

ブローイング比が大きすぎても問題が生じる。流体を強く噴出させると、膜が壁面から浮き上がってしまう。噴出された噴流が壁面を覆うことなく上方に舞い上がる。そうすると壁面が再び高温ガスに晒される。ブローイング比が小さすぎると、膜が薄すぎてすぐに吹き払われてしまう。そのため強さにも適切な値が存在する。角度、間隔、強さを総合的に調整してこそ優れた膜となる。

膜が剥がれる理由の一つは渦である。流体が孔から噴出する際、左右に回転する一対の渦が発生する。この渦が高温ガスを壁面側へと引き込む。すると、せっかく形成した冷却膜が持ち上げられて剥がれてしまう。壁面が再び高温ガスに晒されることになる。孔を適切に設計すれば、この渦を弱めることができる。そのため近年

では、孔の出口を扇状に広げたファン形状の孔を用いる。噴出された流体が横方向に広く拡散し、壁面を均一に覆う。

扇形孔は円形孔よりも冷却膜を広く展開する。円形孔は流体を一本の噴流として噴出する。この噴流は壁面から浮き上がりやすい。扇形孔は出口を横に広げて流体を幅広く噴出する。広く広がった流体は壁面により密着しやすい。密着する面積が広がれば壁面を均一に覆うことができる。そのためガスタービンや航空エンジンでは扇形孔が好んで用いられる。孔をどれだけ広げるか、どの角度で穿孔するかが性能を左右する。

最適な孔形状を見出すには流れを計算しなければならない。渦まで詳細に把握するには精密な解析が必要である。この解析をラージエディシミュレーション（large eddy simulation, LES）と呼ぶ。LESは流れの中の大きな渦を直接計算する手法である。高精度であるが計算コストが極めて高い。一つの条件を解くだけでも長時間を要する。孔の角度、間隔、噴出強度を変えながら数百通りをすべて計算することは困難である。計算予算が限られているため、手当たり次第に条件を計算するわけにはいかない。

ここでガウス過程（Gaussian process）が役立つ。ガウス過程は少量のデータから予測を行う手法である。その特徴は単に予測値を出力するだけにとどまらない点にある。予測がどれほど不確実であるかも併せて出力する。データが多い領域では高い確信度で予測する。データが存在しない領域では不確実である则表示する。あたかも地図を描く際に、通った道は詳細に、通っていない道はぼかして描くようなものである。この手法はマテルン（Matern）と呼ばれる滑らかな規則によって値の間を補間する。

ガウス過程が値を補間する仕組みについても見てみよう。近接した条件同士であれば性能も類似するはずである。孔の角度をごくわずかに変更すれば、冷却性能もわずかに変化するだけである。この考え方を数学的に表現したものがカーネルである。カーネルは二つの条件がどれほど近いかを測る尺度である。近ければ値が類似していると見なし、遠ければ値が異なる可能性があるから見なす。この尺度に基づいて、計算済みの条件間を滑らかにつなぐ。計算していない条件の値も推定する。

能動学習（active learning）は、ここに賢明な選択を加える。次にどの条件をLESで計算すべきかを自ら選定する。選定の際には二つの要素を同時に考慮する。一つは性能が優れていると見込まれる領域である。もう一つは不確実性が高い領域である。性能が良さそうな領域を探索すれば、より優れた解に近づく。不確実な領域を探索すれば、地図の不鮮明な部分が鮮明になる。この二つのバランスを取る規則を獲得関数（acquisition function）と呼ぶ。頻繁に用いられる規則は、現在よりもどれほど改善されるかの期待度を測定する方式である。

この手法の利点は、計算順序を賢く決定できる点にある。無作為にあらゆる条件を計算することはない。得られる知見が多い条件から優先して計算する。そのため、少ないLES計算回数でも優れた孔形状へと到達できる。計算コストを抑えながら設計候補を迅速に絞り込む。この方式はガスタービン翼の冷却孔設計において先行して定着した。これまでに検証された研究は主にガスタービンを対象としている。複数の目標を同時に考慮するベイズ最適化によって、冷却性能と均一性を同時に向上させた。ある研究では、同一の圧力損失条件下において、従来の設計よりも冷却性能を向上させたと報告している。

人工知能を流動計算そのものに適用することもある。2024年頃の研究では、フィルム冷却効率を予測するニューラルネットワークが構築された。ある研究では、壁面の曲率や孔の角度が変化しても冷却効率を予測した。このような予測モデルは、精密計算に近い値をはるかに高速に出力する。設計初期において多様な孔形状を迅速に比較検討するのに役立つ。ガウス過程が次の計算条件を選定し、ニューラルネットワークがその計算を素早く近似推定するというように、両者を組み合わせることもある。

ロケット燃焼室のフィルム冷却にも同様の手法が応用される。ただし、ロケットは条件がはるかに過酷である。ガスはより高温で、流速もより速い。そのため航空エンジンで得られた最適な孔の数値をロケットにそのまま流用してはならない。孔の大きさ、流体速度、壁面曲率、燃料の種類が異なれば結果も変化する。優れた設計手法は適用できるものの、具体的な最適値は毎回探索し直さなければならない。人工知能は、その再探索プロセスをさらに高速化するツールである。最終形状はロケットの作動条件下で改めて検証する必要がある。

9.4 冷却流路の形状を人工知能で設計する

冷却流路の設計は固体と流体が絡み合う問題である。高温ガスの熱はまず金属壁へと伝わる。その熱は金属の内部を通して冷却流路側へと伝達される。流路では、流れる燃料がその熱を奪う。金属内部を伝わる熱伝導と流体が奪う対流が一点で出会う。この二つを同時に解く計算を共役熱伝達（conjugate heat transfer, CHT）と呼ぶ。ロケットの冷却流路は固体と流体が強く絡み合っているため、この計算が重要となる。

冬の窓を思い浮かべると理解しやすい。部屋の中は暖かく、外は寒い。ガラス窓の内側面と外側面の温度は異なる。ガラスの内部を熱が流れ、ガラスの外側では冷たい空気が熱を奪う。ガラス内部の熱伝導と外気の対流が窓の表面で出会う。ロケットの壁もこれと同様である。高温ガス側から熱が入り込み、冷却流路側では燃料が熱を奪う。二つの流れが壁で出会い、平衡を保つ。

共役熱伝達の核心は境界における約束事である。金属と燃料が接する面を考えてみよう。金属からその面へと出ていく熱と、燃料がその面から受け取る熱は等しくなければならない。熱は消滅することも生成されることもないからである。この約束事を守りながら壁面温度を計算しなければならない。壁の中で温度が最も高くなる場所がどこか、そこをどのように冷却すべきかを、この計算が教えてくれる。

共役熱伝達計算は計算量が多い。固体内部の熱伝導と流体内部の対流を同時に解かなければならないからである。その上、流体は乱流である。乱流は大小さまざまな渦が入り混じった流れである。この流れを精密に解くほど計算時間はさらにかかる。一つの冷却流路を精密に解くだけでもコンピュータに長い時間を要する。設計候補が数千個あれば、その計算を数千回行わなければならない。そのため、計算を減らす工夫が必要となる。

いよいよ流路形状を設計する段階である。ここにトポロジー最適化（topology optimization）を用いる。トポロジー最適化は、定められた空間を材料で満たすか空洞のまま残すかを探索する手法である。冷却流路においては、どこを金属とし、どこを燃料が流れる空洞流路とするかを決定する問題となる。人間が前もって流路形状を決めることはない。目標さえ設定すれば、最適化が流路形状を自ら描き出す。目標は壁面の最高温度を下げることである。同時に圧力損失も過大にならないようにする。冷却流路をトポロジー最適化によって設計する研究は既になされている。流れと熱を同時に観察しながら材料配置を少しずつ変更していく密度ベース法がその代表である。

この問題は扱う変数が極めて多い。空間を細かく分割した格子は数十万個に及ぶ。格子ごとに金属か空洞かを決定しなければならない。組み合わせの数は数え切れないほど多い。この広大な空間をそのまま探索すると、果てしない時間がかかる。そのため、問題を縮小する工夫が必要となる。ここに畳み込みオートエンコーダ（convolutional autoencoder, CAE）が登場する。

オートエンコーダは、複雑なデータを小さく圧縮してから復元するニューラルネットワークである。前段部分は流路形状を小さな数値群へと圧縮する。この数値群を潜在ベクトル（latent vector）と呼ぶ。後段部分は、その潜在ベクトルから再び流路形状を復元する。十分に学習させれば、わずかな数値だけで流路の核心的な形状を表現できる。写真を小さなファイルに圧縮してから再度開くのと似ている。畳み込みは画像の隣接部分をまとめて処理する計算方式である。流路形状のように空間的に広がったデータを扱うのに適している。

オートエンコーダによって設計空間を縮小するこの手法を、ロケットの冷却流路にそのまま適用した検証事例はまだ稀である。本書はその方向性を提案する。トポロジー最適化自体は検証済みの手法であり、ここにオートエンコーダを組み合わせることで探索を高速化しようというものである。

この圧縮が設計を容易にする。最適化器は数十万個の格子を直接扱わない。代わりに小さな潜在ベクトルのみをあこれ変化させる。潜在ベクトルを少し変更すると、後段部分が妥当な流路形状を生成する。広大な設計空間を小さな空間へと縮小して探索するわけである。最適化器はこの小さな空間の中で優れた潜在ベクトルを探索する。そのベクトルが生成する流路が優れた冷却流路となる。

潜在ベクトルを用いる利点は他にもある。生成される流路形状がおおむね妥当なものとなる点である。オートエンコーダが実際の流路データを観察して学習したからである。学習によって身につけた形状の枠組みの中で新たな形状を生成する。そのため、物理的にあり得ない奇妙な形状が生成されにくくなる。広大な空間を手当たり次第に探索する際に生じる無駄を減らせる。狭く本質的な空間でのみ解を探索するため、探索が高速化する。ただし、学習データと似ているということだけで優れた流路であることが保証されるわけではない。流路

が始点から終点まで適切につながっているか、壁が薄すぎないか、流動抵抗や構造強度が十分であるかは別途確認しなければならない。こうした条件は、最適化内部に制約条件として個別に設定しておく必要がある。

製造可能な形状であるという条件も併せて組み込まなければならない。3Dプリンティングは上へと積層しながら造形する。下部の支持構造なしに横へと傾きすぎる部分は、製造過程で垂れ下がってしまう。そのため、流路壁が一定の角度を超えて傾かないよう制約を課す。この制約を守れば、支持構造なしでも自立する流路となる。このような条件まで最適化に組み込めば、得られた設計を直ちにプリントすることができる。計算上の優れた設計が、実際には製造不可能な設計になってしまう事態を防ぐ。

共役熱伝達計算を人工知能で代替する研究もある。2024年のある研究では、エンコーダとデコーダを幾層にも積み重ねたニューラルネットワークを構築した。このニューラルネットワークは部品の形状を入力として受け取り、温度分布を直ちに描出した。精密な共役熱伝達計算を毎回実行する代わりに、高速な予測へと置き換えたのである。2025年の別の研究では、固体と流体をそれぞれ異なるニューラルネットワークに分けて扱った。二つのニューラルネットワークが境界において互いに値を一致させるよう学習させた。こうすることで、壁面と燃料が接する面の急激な温度変化をより正確に捉えることができる。これらの研究は一般的な共役熱伝達問題を扱ったものである。ロケット冷却流路のトポロジー最適化においてこのような高速予測モデルを用いれば、設計探索が高速化する。その統合は今後洗練させていくべき方向性である。

トポロジー最適化が描き出す流路は、人間が手作業で描くのが困難な形状である。枝が分かれては合流し、壁の曲面に沿って湾曲する。魚の骨のように斜めのフィンがびっしりと並ぶこともある。こうした形状は熱を均等に分散させ、流れを滑らかに誘導する。人間の目には好ましく見えなくとも、計算上は優れた形状である場合がある。人工知能はこのような思いがけない形状を発見してくれる。

この手法の産業事例が存在する。ある企業はこのようなトポロジー最適化技術をロケットの冷却流路に適用した。その結果、壁面の最高温度を大幅に低減させたと発表した。近年では、周期曲面を冷却流路に用いる研究も発表されている。この曲面を三重周期極小曲面 (triplly periodic minimal surface, TPMS) と呼ぶ。TPMSはシャボン玉の膜のように滑らかに湾曲した曲面が空間内に規則的に繰り返される構造である。この構造は狭い空間に広い表面積を折り込む。表面積が広ければ、より多くの熱をやり取りできる。2025年のある研究では、壁の曲面に沿って覆うTPMS流路を構築した。その結果、冷却性能と壁面周囲の温度均一性が同時に向上したと報告されている。2026年には、格子内部を満たした冷却流路によって熱伝達を高める研究も発表された。こうした曲面流路や格子流路は、3Dプリンティングがあって初めて製造可能となる。ただし、企業の事例は学術論文と検証方式が異なる。本書では産業動向を示す参考事例としてのみ扱う。最終的な性能は、独立した試験データが存在する場合にのみ設計根拠とすべきである。

9.5 煤が堆積するコーキングを低減する多目的最適化

ケロシン系燃料であるRP-1は、冷却剤として使用される際に一つの弱点を持つ。高温の壁面付近を通過する際、燃料が熱によって分解される。これを熱分解と呼ぶ。分解された破片のうち炭素が壁にこびりつく。フライパンに油を長時間放置すると黒く焦げ付くのと同様である。このように壁面に付着する炭素の堆積物をコーキング (coking) と呼ぶ。コーキングは冷却流路の内側に徐々に蓄積していく。

燃料が熱によって分解される現象を熱分解と呼ぶ。大きな分子が熱を受けて小さな破片へと分かれる過程である。温度が高いほど分解は速まる。分解された破片のうち炭素を多く含むものが互いに凝集する。凝集した炭素が壁にこびりついて堆積物となる。したがって、壁が高温であるほどコーキングが発生しやすい。コーキングは壁面温度、燃料の種類、通過時間に複合的に依存する。

コーキングはノズルスロット部で発生しやすい。ノズルスロットは熱流束が最大となる場所である。壁がそれだけ高温であるため、燃料の分解も活発になる。コーキングは二つの問題を引き起こす。一つは、炭素の堆積物が熱を伝えにくい点である。堆積物が壁と燃料の間を遮り、壁がさらに高温になる。もう一つは、堆積物が流路を狭める点である。流路が狭くなると燃料が通過しにくくなり、圧力損失が増大する。二つの問題が重なると壁面が危険に晒される。再使用エンジンでは、コーキングが試験を重ねるごとに蓄積するため、さらに深刻な問題となる。

温度とコーキングの関係には法則がある。温度がわずかに上昇するだけでも化学反応は大幅に加速する。壁面温度が高くなると、燃料の分解は目に見えて速くなる。それだけコーキングも急速に蓄積する。そのため、壁面温度をわずかに下げただけでもコーキングを大幅に低減できる。冷却を適切に行えば壁が冷え、壁が冷えればコーキングが減少する。冷却とコーキングの抑制は、このように結びついている。

前節の熱伝達劣化が、このコーキングと連動する。超臨界燃料が擬臨界線を通過する際、壁近傍の熱伝達が急激に悪化する。するとその箇所の壁面温度が急上昇する。壁が高温になると燃料がより急速に分解され、コーキングが急速に蓄積する。蓄積したコーキングは熱をさらに遮断し、壁をより高温にする。このフィードバックが続くと、壁が突然破損するおそれがある。熱伝達劣化とコーキングは互いを増長させ合う関係にあるといえる。

コーキングを低減するには壁面温度を下げなければならない。壁の温度が低ければ、燃料の分解も抑えられる。これに加えて、壁近傍の流れも併せて考慮しなければならない。燃料が壁面を高速ですれ違って通過すれば、堆積物が付着する余地が減少する。壁近傍で流体が壁を擦る力を壁面せん断応力と呼ぶ。この力がある程度強くなければ、堆積物は付着しにくくならない。コーキング抑制設計は、壁面温度と壁面せん断を同時に制御する問題である。

問題は目標が複数存在し、互いに衝突する点にある。壁面温度を下げようとする目標がある。圧力損失を低減しようとする目標がある。コーキングを抑制しようとする目標がある。これらの目標は同時に改善することはない。流路を狭めて流れを速くすれば壁は冷えるが圧力損失が増大する。流路を広げて流れを遅くすれば圧力損失は減少するが冷却が弱まる。一方を得れば他方を失う。このように複数の目標が衝突する問題を多目的最適化と呼ぶ。

このようなトレードオフは日常生活でも身近である。靴を選ぶ際を思い浮かべてみよう。軽くて丈夫で安価な靴をすべて満たすことは難しい。軽ければ壊れやすく、丈夫であれば重いが高価になる。そのため、私たちは用途に応じた妥協点（バランス）を選択する。冷却流路の設計も同様である。冷却性能、圧力損失、コーキング抑制のすべてを最高にすることはできない。一方を得れば他方を少し譲歩することになる。

多目的最適化の解は一つではない。代わりにトレードオフの関係にある複数の優れた解の集合が得られる。この集合をパレートフロント（Pareto front）と呼ぶ。パレートフロント上の解はそれぞれバランスの取り方が異なる。ある解は冷却を優先し、ある解は圧力損失を優先する。設計者はこの集合を確認し、エンジンに適したバランスの解を選択する。人間が事前に一つの解を決定する代わりに、優れた候補群を展開してその中から選択する手法である。

ここでベイズ最適化（Bayesian optimization）が用いられる。前節のガウス過程と能動学習を複数の目標へと拡張した手法である。まず少ない計算量で諸目標の大まかなマップを作成する。そのマップを参照して次にどの条件を計算するかを選択する。パレートフロントを拡張する上で大いに役立つ条件から優先して計算を行う。計算コストの高い燃焼解析の回数を抑えながらも、優れたバランスの解を見つけ出す。コーキングまで目標に組み込めば、壁面温度、せん断応力、圧力損失を総合的に秤にかけられる設計が得られる。ただし、ロケットの冷却流路においてコーキングを目的関数として最適化した検証事例はまだ見出すのが困難である。熱分解と沈着の物理現象は十分に知られているため、本書はその物理を目標に組み込んで設計する方向性を提案する。

コーキングは再使用エンジンにおいてさらに大きな課題となる。だからといって、使い捨てのエンジンがコーキングから自由であるわけではない。一度の燃焼中でも、堆積物が流路を狭めたり熱伝達を悪化させたりすると、壁が破損するおそれがある。再使用の有無にかかわらず、ミッション時間内に堆積物がどれほど速く蓄積するかが重要である。何度も再使用するエンジンでは、ここに累積の問題が加わる。燃焼試験を重ねるにつれて、堆積物が少しずつ蓄積する。蓄積した堆積物が冷却を次第に悪化させる。そのため、再使用エンジンはコーキングを最初から抑制するように設計しなければならない。人工知能による最適化は、この長時間の変化まで見据えた設計を支援する。

この方法をロケットの試験データと結び付けることもある。ドイツ航空宇宙センターのランプホルツハウゼン試験場は、ロケットエンジンを実際に燃焼させてデータを取得する場所である。このような試験データがあれ

ば、最適化の基盤モデルがより正確になる。計算だけでは見落とす実際のコーキング挙動をデータが補ってくれる。試験と計算を行き来しながら設計を磨き上げる流れである。

アスペクト比の高い流路がコーキング抑制に用いられることもある。アスペクト比は流路の高さを幅で割った値である。狭くて深い流路はアスペクト比が高い。このような流路は壁と接する面積が広く、熱をよく奪う。壁がさらに冷やされるため、燃料の分解が減る。螺旋のように巻き付く流路を用いることもある。流れを旋回させると、壁の近くをより強くかすめる。ただし、このような流路は圧力損失が大きくなる可能性があるため、合わせて検討しなければならない。

この節にも注意すべき点がある。コーキング減少の数値は、実際の試験によって裏付けられたときにのみ信頼できる。そのため、本書は具体的な数値の代わりに方法の原理に集中する。実際のエンジンでは、燃料組成、表面粗さ、壁の触媒作用、運転時間がすべてコーキングに影響を与える。変数が多く、予測が難しい。試験による裏付けのないコーキング予測値は保守的に扱う必要がある。人工知能は有望な候補を絞り込むために使い、確定は実際の燃焼試験によって行う。

9.6 ポンプ前翼インデューサを設計する物理補強機械学習

ロケットエンジンは燃料と酸素を燃焼室へ強く押し込まなければならない。この役割を果たすのがターボポンプ (turbopump) である。ターボポンプは非常に高速で回転するポンプである。ところが、ポンプの主翼は入口圧力が低いと正常に機能しない。そのため、主翼の前に補助翼を一つ配置する。この補助翼がインデューサである。インデューサは液体をまず穏やかに引き込んで圧力を少し上げる。そのおかげで、後方の主翼が安定して回転する。ポンプの門番のような部品である。

なぜターボポンプが必要なのかから見てみよう。燃焼室内は圧力が非常に高い。燃料をその中へ押し込むには、さらに高い圧力が必要となる。低圧の燃料は高圧の燃焼室に入ることができない。水が低い場所から高い場所へ自然には流れないのと同じである。そのため、ポンプによって燃料の圧力を大幅に引き上げる。ロケットのターボポンプは、この役割を非常に高速な回転によって果たす。大型エンジンのターボポンプは1分間に数万回転する。

インデューサは液体水素を取り扱う際、さらに扱いが難しくなる。液体水素 (liquid hydrogen) はマイナス253度ほどになる極めて冷たい液体である。密度が小さく軽い。インデューサが高速で回転すると、翼の前方に圧力が急激に低下する場所が生じる。液体は圧力が十分に下がると沸騰する。熱くなくても、圧力さえ低ければ気泡が発生する。山の上で水が低い温度でもよく沸騰するのと同じ原理である。このように流れる液体の中に気泡が生じる現象をキャビテーション (cavitation) と呼ぶ。

キャビテーションはインデューサを悩ませる。生じた気泡は、圧力が再び高い場所へと流れると一瞬で押し潰される。気泡が潰れる際、極めて強い圧力波動が発生する。この波動が翼の表面を少しずつ削り取る。長期間さらされると翼が侵食される。キャビテーションはポンプの性能も低下させる。気泡が増加すると、ポンプが押し上げる圧力が急激に崩壊する。この崩壊点を超えると、エンジン全体が危険にさらされる。そのため、インデューサはキャビテーションの発生をできるだけ遅らせるように設計しなければならない。

一つ助けになる性質がある。極低温液体には熱力学的抑制効果がある。気泡が生じるには、周囲の液体から蒸発潜熱を奪わなければならない。そうすると気泡の周囲の温度がわずかに低下する。温度が下がると、その場所の沸騰圧力も低くなる。そのため、気泡がそれ以上成長しにくくなる。気泡が自ら自らの成長を抑え込むわけである。液体水素はこの抑制効果が大きいので、キャビテーションがいくらか遅れる。インデューサの設計では、この効果まで計算に入れなければならない。物理補強学習の物理規則にもこの効果を取り入れる必要がある。そうでなければ、キャビテーション性能を実際よりも悪く誤認してしまう。

インデューサの設計は翼の形状を決める作業である。翼の角度、反り、前方へのスweepの程度が性能を左右する。目標は三つある。圧力を十分に上げること、効率が高いこと、そしてキャビテーションの発生を遅らせることである。これらの目標も互いに相反する。圧力を強く上げようと翼を立てるとキャビテーションが発生しやすくなる。キャビテーションを避けようと翼を寝かせると、圧力が上がりにくくなる。前節までと同様の

バランスの問題である。

インデューサが圧力を引き上げる能力には限界線がある。入口圧力を少しずつ下げながらポンプを運転してみるとしよう。ある地点まではポンプが十分に耐える。しかし、入口圧力がある値を下回るとキャビテーションが激しくなる。その瞬間、ポンプが引き上げる圧力が急激に崩壊する。この崩壊する地点を揚程遮断点と呼ぶ。揚程（水頭）はポンプが流体を押し上げる力の大きさである。実際のポンプでは、気泡が最初に発生する地点と揚程が完全に崩壊する地点を区別する。その間で揚程が3パーセント低下する地点を基準とすることもある。この値をNPSH3と呼ぶ。初期キャビテーション、NPSH3、完全揚程崩壊はそれぞれ異なる地点である。優れたインデューサは、この遮断点をより低い入口圧力まで遅らせる。それだけ低い圧力でも安定して回転する。この性質はロケットの重量とも結び付く。インデューサが低圧によく耐えられれば、燃料タンクの圧力を低く保つことができる。タンクの圧力が低ければ、タンクの壁を薄く作ることができる。タンクが軽くなれば、ロケット全体が軽くなる。小さな翼一つの設計がロケットの重量まで変えるわけである。

ここに物理補強機械学習（physics-enhanced machine learning）を用いる。純粋なデータのみを学習した機械学習は、物理法則に反する恐れがある。そのため、流体の保存則とキャビテーションの物理を学習に組み込む。流れ場はフーリエニューラルオペレータ（Fourier neural operator, FNO）によって迅速に近似する。この演算子は、流れの全体像を一度に高速予測するニューラルネットワークである。通常のニューラルネットワークが一点の値を予測するのに対し、この演算子は流れ場全体を丸ごと予測する。流れを様々な大きさの波に分けて扱うため、大きな流れと微細な波を同時に捉える。そのため、流動場のように空間に広く分布する値を素早く近似するのに適している。翼の形状を変えながら、流れとキャビテーションのリスクを迅速に調べることができる。精密な計算を毎回実行するよりもはるかに高速である。フーリエニューラルオペレータ自体は多様な流体問題で検証済みの手法である。これを液体水素インデューサの逆設計に適用することは、本書が提案する方向性である。

インデューサの設計において人工知能が参照する情報は多岐にわたる。翼前方の圧力分布を見る。どこで圧力が大きく低下し、そこでキャビテーションがどれほど成長するかを確認する。翼後方で圧力がどれほど回復するかも見る。これらの情報を統合して優れた翼形状を見つけ出す。翼を前方にスweepさせた形状は、キャビテーションを遅らせるのに役立つ。人工知能はこのような形状を多数生成し、迅速に比較する。

人工知能はキャビテーションの診断にも用いられる。2025年のある研究では、ハイスピードカメラでインデューサのキャビテーションを撮影し、その映像をニューラルネットワークで解析した。空間パターンを見るニューラルネットワークと時間変化を見るニューラルネットワークを併用した。このようにすると、キャビテーションが不安定化する瞬間を捉えることができる。目視では確認が困難な高速の変化を人工知能が検知する。この研究はキャビテーションを識別する診断の領域である。流れを代替計算するサロゲートモデルや、翼形状を探索する逆設計とは用途が異なる。三つを混同せず、区別して捉える必要がある。

インデューサの設計は流体計算だけで終わらない。翼は極めて高速で回転するため、大きな力を受ける。キャビテーションの気泡が崩壊する際の波動も翼に衝突する。そのため、翼がこれらの力に耐えられるかも併せて確認しなければならない。冷却流路の設計が熱と流れのバランスであるならば、インデューサの設計は流れ、力、そしてキャビテーションのバランスである。人工知能はこれら複数の目標を総合的に比較衡量するために用いられる。

ここにも限界は明確である。極低温水素の試験は困難で費用がかさむ。マイナス250度を超える液体を取り扱う試験設備自体が多くない。そのため、インデューサ設計の検証データは十分ではない。キャビテーション低減の数値は、実際のポンプ試験で裏付けられたときのみ信頼できる。そのため、本書は確認されていない数値を用いない。代わりに、物理補強モデルがどのような情報をもとに設計を支援するのに集中する。人工知能が優れた翼候補を絞り込んだとしても、最終的な判断は実際のポンプ試験によって下さなければならない。

まとめ

本章では、ロケットエンジンの熱管理構造を人工知能によって設計する手法を概観した。取り上げた構造は三つである。壁内部の冷却流路、壁面に冷却膜を形成するフィルム冷却孔、そして燃料を押し上げるポンプ前翼

インデューサである。三つの構造は、いずれも同じ性質の課題を抱えている。熱と流れのバランスの問題である。一方を強く求めれば、他方を失うことになる。この均衡点を迅速に見つけ出すために人工知能が導入された。

その背景には二つの大きな変化があった。一つは金属3Dプリンティングである。切削加工では製作できなかった複雑な内部流路を作成できるようになった。設計の自由度が大幅に広がった。もう一つは、熱をよく伝える銅合金GRCop-42のような新材料である。自由な設計と優れた材料が結びつくことで、新たな冷却構造が可能となった。ただし、新しい製造方式は品質管理に敏感であるため、製造プロセスを厳密に監視しなければならない。

人工知能は様々な形で活用された。サロゲートモデルは遅い流体計算を代替し、超臨界燃料の挙動を高速に近似した。ガウス過程能動学習は高コストな計算を節約しながら有望なフィルム冷却孔を探索した。畳み込みオートエンコーダは複雑な流路形状を低次元の数値空間に圧縮し、トポロジー設計を容易にした。多目的ベイズ最適化は相反する目標同士の均衡点を見出し、コーキングを抑制した。物理補強機械学習とフーリエニューラルオペレータは、インデューサのキャビテーションを制御する設計を支援した。

本章の手法は互いに結び付いている。サロゲートモデルが流れを素早く近似する。能動学習がその近似をもとに次の計算を選択する。オートエンコーダが設計空間を圧縮して探索を容易にする。ベイズ最適化が複数目標の均衡点を見出す。物理補強学習が物理法則を守らせる。単一のツールのみを用いるのではなく、複数のツールを組み合わせる使用。課題に応じて選択し組み合わせることが設計者の役割である。

一貫して流れる原則がある。人工知能は答えを代わりに決定するツールではない。広大な設計空間から有望な候補を迅速に絞り込むためのツールである。サロゲートモデルは学習した範囲内でのみ信頼できる。企業事例の性能数値は学術的検証とは異なる。出所が確認されていない数値は使用しない。ロケットエンジンの冷却は、壁が一度溶融すればエンジンが破損する分野である。そのため、最終的な判断は常に高精度な計算と実際の燃焼試験によって下される。

本章の手法には共通点がある。いずれも高コストな計算を節約するための工夫である。精密な計算は正確であるが遅い。その遅い計算を毎回実行しては設計が終わらない。そのため、人工知能が高速な近似を肩代わりする。サロゲートモデルが計算を代替し、能動学習が計算順序を選定し、オートエンコーダが問題を縮小する。節約した時間によって、より多くの候補を検討することができる。検討する候補が増えるほど、最適な答えに近づく確率が高まる。

今後の方向性もこの原則の上にある。物理知識をより深く組み込んだ機械学習が発展している。設計と診断をつなぐ流れも広がっている。人工知能が設計候補を出し、試験がその候補を検証し、その試験データが再び人工知能を育てる。この循環がロケットエンジンの熱管理設計を少しずつ前へと押し進めている。この章を一文に要約すると次のようになる。熱と流れの困難なバランス問題を、広がった設計自由度の上で、人工知能が素早く解くよう手助けする。そしてその答えは常に試験で確認する。道具は速くなったが、検証の原則はそのまま変わらない。次の章では、このように作ったエンジンを実際に動かすとき、人工知能がどのようにエンジンを診断し制御するのかを扱う。

関連根拠資料

- Pizzarelli, M. (2017). Regenerative cooling of liquid rocket engine thrust chambers: Modeling and simulation. *Journal of Propulsion and Power*, 33(4), 802-821. <https://doi.org/10.2514/1.B36261>
- Waxenegger-Wilfing, G., Dresia, K., Deeken, J., & Oschwald, M. (2020). Heat transfer prediction for methane in regenerative cooling channels with neural networks. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 34(2), 347-357. <https://doi.org/10.2514/1.T5865>
- Dresia, K., Waxenegger-Wilfing, G., Riccius, J., Deeken, J., & Oschwald, M. (2023). Improved wall temperature prediction for the LUMEN rocket combustion chamber with neural networks. *Aerospace*, 10(5), 450. <https://doi.org/10.3390/aerospace10050450>
- Waxenegger-Wilfing, G., Dresia, K., Deeken, J., & Oschwald, M. (2021). Machine learning methods for the design and operation of liquid rocket engines: Research activities at the DLR Institute of Space Propulsion. *arXiv*. <https://arxiv.org/abs/2102.07109>
- Gradl, P. R., Protz, C. S., Cooper, K., Ellis, D., & Evans, L. J. (2019). GRCop-42 development and hot-fire testing using additive manufacturing powder bed fusion for channel-cooled combustion chambers. *AIAA Propulsion and Energy 2019 Forum*. <https://doi.org/10.2514/6.2019-4228>

- NASA NTRS. (2019). GRCop-42 development and hot-fire testing using additive manufacturing powder bed fusion for channel-cooled combustion chambers. Document ID 20190030433. <https://ntrs.nasa.gov/citations/20190030433>
- Gradl, P., Mireles, O. R., Katsarelis, C., Smith, T. M., Sowards, J., Park, A., et al. (2023). Advancement of extreme environment additively manufactured alloys for next generation space propulsion applications. *Acta Astronautica*, 211, 483-497. <https://doi.org/10.1016/j.actaastro.2023.06.035>
- NASA. (2023). GRCop-42 additive manufacturing for high heat flux thrust chamber liners. NASA Technical Reports Server. <https://ntrs.nasa.gov/citations/20230007103>
- NASA. (2023). Rapid Analysis and Manufacturing Propulsion Technology (RAMPT) project. NASA. <https://www.nasa.gov/rapid-analysis-and-manufacturing-propulsion-technology/>
- Demeneghi, G., Williams, B. B., Katsarelis, C., Tilson, W., & Gradl, P. (2025). Additively manufactured GRCop-42 copper-alloy combustion chamber failure analysis: The role of build interruptions. *Engineering Failure Analysis*, 174, 109509. <https://doi.org/10.1016/j.engfailanal.2025.109509>
- Ferster, K. K., et al. (2025). An open tool for the design of cooling channels within regeneratively cooled liquid rocket engines. *AIAA SciTech 2025 Forum*. <https://doi.org/10.2514/6.2025-2127>
- NIST. (2026). Thermophysical properties of fluid systems. NIST Chemistry WebBook. <https://webbook.nist.gov/chemistry/fluid/>
- Banuti, D. T. (2020). Pseudo-boiling and heat transfer deterioration while heating supercritical liquid rocket engine propellants. *Journal of Supercritical Fluids*, 165, 104895. <https://doi.org/10.1016/j.supflu.2020.104895>
- Zhu, B., Zhang, Q., Ma, L., & Shi, H. (2025). Analysis of heat transfer deterioration mechanism of supercritical fluid based on VOF two-phase method and pseudo-boiling theory. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 240, 126643. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2024.126643>
- Xiao, R., Zhang, P., Chen, L., & Hou, Y. (2023). Machine learning based prediction of heat transfer deterioration of supercritical fluid in upward vertical tubes. *Applied Thermal Engineering*, 228, 120477. <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2023.120477>
- Gong, K., Zhang, Y., Cao, Y., Feng, Y., & Qin, J. (2024). Deep learning approach for predicting the flow field and heat transfer of supercritical hydrocarbon fuels. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 219, 124869. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2023.124869>
- Ko, S., Gil, Y., & Park, S. (2026). Development of RP-3 surrogate fuels via multi-objective genetic algorithm for regenerative cooling CFD with supercritical property fidelity. *Aerospace*, 13(4), 307. <https://doi.org/10.3390/aerospace13040307>
- Zhang, H., Gou, J., Yin, P., Su, X., & Yuan, X. (2023). Film-cooling hole optimization and experimental validation considering the lateral pressure gradient. *Frontiers in Mechanical Engineering*, 8, 973293. <https://doi.org/10.3389/fmech.2022.973293>
- Wang, Y., Wang, Z., Qian, S., Qiu, X., Shen, W., Zhang, X., Lyu, B., & Cui, J. (2024). Data-driven framework for prediction and optimization of gas turbine blade film cooling. *Physics of Fluids*, 36(3), 035160. <https://doi.org/10.1063/5.0186087>
- Yao, G., Li, D., Zhu, J., Tao, Z., & Qiu, L. (2024). Hybrid AI framework for the predictions of film cooling effectiveness distribution with various surface curvatures and compound angles. *Applied Thermal Engineering*, 257, 124147. <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2024.124147>
- Navah, F., Lamarche-Gagnon, M.-E., & Ilinca, F. (2023). Thermofluid topology optimization for cooling channel design. *arXiv:2302.04745*. <https://arxiv.org/abs/2302.04745>
- Gao, C., Xu, W., Zhu, X., Cui, J., Luo, T., Wang, D., Sun, L., Ling, W., Li, X., & Zhou, W. (2025). Enhanced regenerative cooling performance with conformal TPMS channels. *Energy*, 322, 135530. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2025.135530>
- Fu, R., Miao, X., Gao, L., Duan, L., Xu, Y., Guo, M., Luo, P., & Hu, J. (2026). Numerical study of flow and heat-transfer enhancement in lattice-core regenerative cooling channels for liquid rocket engines. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 175, 111069. <https://doi.org/10.1016/j.icheatmasstransfer.2026.111069>
- Ebbs-Picken, T., Romero, D. A., Da Silva, C. M., & Amon, C. H. (2024). Deep encoder-decoder hierarchical convolutional neural networks for conjugate heat transfer surrogate modeling. *Applied Energy*, 372, 123723. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2024.123723>
- Lee, J., Shin, S., Choi, H., Lee, A., Park, B., & Lee, S. (2025). Extended multiphysics-informed neural network for conjugate heat transfer problems. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 246, 127098. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2025.127098>
- Lee, S., Yoon, Y., & Song, S. J. (2025). Deep learning-based identification of turbopump inducer cavitation instability using high-speed camera images. *AIAA SciTech 2025 Forum*. <https://doi.org/10.2514/6.2025-0760>
- Li, Z., Kovachki, N., Azizzadenesheli, K., Liu, B., Bhattacharya, K., Stuart, A., & Anandkumar, A. (2021). Fourier neural operator for parametric partial differential equations. *International Conference on Learning Representations*. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2010.08895>
- Raissi, M., Perdikaris, P., & Karniadakis, G. E. (2019). Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations. *Journal of Computational Physics*, 378, 686-707. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2018.10.045>
- DLR Institute of Space Propulsion. (2026). Test facilities at Lampoldshausen and rocket propulsion research. DLR. <https://www.dlr.de/en/ra>

第10章 液体ロケットエンジン（LRE）のリアルタイム欠陥診断、デジタルツインおよび強化学習に基づく推進リアルタイム適応制御

はじめに

自動車を長く運転していると、運転手は音で状態を把握する。エンジンから聞き慣れない音がすれば整備工場へ行く。計器盤に警告灯が点灯すれば速度を落とす。人はこのように複数の信号を合わせて見て判断する。ロケットエンジンも同様である。ただし、ロケットエンジンは自動車よりもはるかに高速で、高温かつ危険である。

液体ロケットエンジンは、液体燃料と液体酸化剤を燃焼させて強大な推力を生み出す。このエンジンは短時間で莫大な熱と圧力を扱う。部品が一つでもわずかに狂えば、全体が破綻に至る恐れがある。そのため、エンジンが作動している間、状態を絶えず監視し続けることが重要である。エンジンが稼働している間、このように状態を見守ることをリアルタイム状態監視と呼ぶ。

本章では、人工知能がロケットエンジンをどのように監視し、制御するのかを扱う。人工知能は英語でArtificial Intelligence、略してAIと表記する。大きく分けて四つの話題を取り上げる。一つ目は、センサー信号から異常を迅速に見つけ出す診断である。二つ目は、目に見えないエンジンの内部をコンピュータ上で描くデジタルツイン（Digital Twin）である。三つ目は、エンジンの経年劣化や製作誤差があってもその不確実性を測定する方法である。最後は、複数のバルブを連動して調整する高度な制御である。

これらの技術が一つに統合されれば、エンジンは自ら健全性を維持できるようになる。この流れは再使用型ロケットの時代に不可欠である。一つのエンジンを何度も使用すれば、使うたびに状態が少しずつ変化する。人間が毎回手作業で調整するのは困難である。人工知能はその変化を迅速に読み取り、対応するための道具である。ここから、これらの技術がどのように動作するのか、その原理を一つずつ解き明かしていく。

本章を読む前に、一つ心構えを共有しておく。人工知能は魔法ではない。データを見て規則性を見出す道具である。データが悪ければ答えも悪くなる。そのため、本章では各技術の有用性とともに関界も明らかにする。確認されていない性能の数値は記載しない。その代わりに、原理を分かりやすく解き明かすことに力を注ぐ。読者が技術の骨格を理解することが目標である。

10.1 LREリアルタイム状態監視の課題

本節で扱うこと

本節では、ロケットエンジンをリアルタイムで監視することがなぜこれほど困難であるかを説明する。まず液体ロケットエンジンがいかに過酷な環境であるかを描き出す。次に、これまで用いられてきた監視方法の限界を指摘する。最後に、人工知能による監視がなぜ必要なのかを論じる。

ここで用いる用語をあらかじめ一つ説明しておく。本章で頻繁に登場するLREは、液体ロケットエンジン（Liquid Rocket Engine）の略語である。以降は液体ロケットエンジンまたはエンジンと表記する。このエンジンは、宇宙へ重い物体を打ち上げる際に広く用いられている。

液体ロケットエンジンは、多数の部品が連動して動作する複雑な機械である。燃焼室は燃料と酸化剤を燃焼させる部屋である。噴射器は燃料と酸化剤を微細に噴霧して混合する部品である。ターボポンプは推進薬を高圧で送り込むポンプである。バルブは推進薬の流れを開閉する。冷却流路は壁面が熔融しないよう熱を逃がす。これらの部品が一つの身体のように連動して初めて、エンジンは正常に作動する。

問題は、この環境が極めて過酷であるという点にある。燃焼室内の圧力は数十気圧に達する。火炎の温度は3千度を超える。ターボポンプは1分間に数万回転する。これらの値は、台所の圧力鍋や自動車のエンジンとは次元が異なる。わずかな揺らぎも強大な力へと拡大する。そのため、エンジンは常に破損のリスクを抱えて稼働し

ている。

この過酷な環境はセンサーにとっても厳しい。センサーは状態を読み取る目である。しかし、センサーが高熱部に近づけば自ら故障してしまう。振動が激しければ配線が断線することもある。視界がかすんだ状態でエンジンを見なければならぬようなものだ。そのため、単一のセンサー値だけを信頼することは難しい。複数のセンサーを総合して見極め、ノイズを除去しなければならない。あるセンサーに異常が生じて、他のセンサーで確認を行う。

信号の量も膨大である。高密度で読み取るセンサー一つが1秒間に数万個の値を出力する。エンジンにはこのようなセンサーが数十から数百個取り付けられる。そうすると1秒間に数百万個もの値が押し寄せることになる。これほど多くの値を人間が目を確認することはできない。さらに、判断はミリ秒単位で完了しなければならない。ミリ秒とは1000分の1秒のことだ。瞬き一回の間に数百回の判断を下さなければならない。この速度とデータ量は、機械の支援なしには処理できない。

エンジンの異常がいかに急速に事故へと発展するか、例を挙げてみよう。燃焼室内で圧力が規則的かつ大きく振動し始める。この振動はわずか数ミリ秒で何倍にも増大することがある。増大した振動は噴射器や壁面を激しく叩く。衝撃が繰り返されると金属に亀裂が生じる。亀裂の隙間から高温のガスが漏れ出す。この一連の過程は瞬く間に起こる。だからこそ、異常の最初の兆候を可能な限り早期に捉えなければならない。

地上試験と実際の飛行では条件が異なる点も難しさの一つだ。地上試験ではエンジンを強固に固定する。センサーを多数取り付けることができる。問題が発生すれば直ちに停止できる。しかし飛行中は事情が異なる。重量制限のためセンサーを多く搭載できない。人間が傍で見守ることもできない。そのため、飛行中のエンジンは限られたセンサーのみで自律的に判断を下さなければならない。人工知能がこの判断を支援する。

ロケットエンジンの診断は、他の機械診断と目標自体は同じである。しかし、条件ははるかに過酷だ。許容時間は短く、利用可能なデータは限られ、リスクは極めて高い。そのため、他分野の手法をそのまま転用することは困難である。ロケットに合わせて手法を再構築しなければならない。本章で紹介する技術は、すべてそのようにして改良を重ねてきた成果であり、その取り組みは現在も続いている。

地上試験も同様に危険を伴う。エンジンを地上に固定して点火する試験をホットファイア（hot-fire）試験と呼ぶ。この試験において、エンジンは実飛行と同等の推力を発生させる。宇宙空間では状況がさらに複雑になる。ロケットが再着陸するためには、エンジンを空中で停止させてから再点火する。このとき推進薬がタンク内で激しく揺れ動く。この液面揺動をスロッシング（sloshing）と呼ぶ。バルブの開閉タイミングもわずかにずれる。このような急激な過渡現象は一瞬で現れて消え去るため、見落としやすい。

ロケットが再着陸する場面を思い浮かべると理解しやすい。打ち上げ時、エンジンは最大の推力を発揮する。着陸時には推力を大幅に絞り、静かに着地しなければならない。この過程でエンジンは推力を大きく増減させる。推進薬タンク内の液体も激しく揺れ動く。バルブは素早く開閉される。温度と圧力が急激に変化する。この短く過酷な瞬間に異常が発生しやすい。だからこそ、この瞬間を決して見逃さずに監視し続けなければならない。

空中でのエンジンの再点火も極めて難易度が高い。軌道上においても地球の重力は依然として大きい。ただし、ロケットと推進薬がともに自由落下しているため、重力がほとんど感じられない。このような状態を微小重力と呼ぶ。微小重力下では、液体がタンク内の所定の位置にとどまらない。そのため、微小な加速や表面張力を利用して推進薬を一箇所に集める必要がある。この工程を経ずにエンジンを点火すると、流れが不均一になる。圧力と流量が瞬間的に急変動する。このような過渡状態において、診断モデルは誤認を起こしやすい。正常であるにもかかわらず異常と誤判定してしまう可能性がある。そのため、診断モデルはこの過渡状態に耐えられるよう学習されなければならない。

これまでエンジンの監視には閾値方式が多く用いられてきた。ある値があらかじめ定めた境界線を超えた場合、エンジンを即座に停止させる方式である。この境界線をレッドライン（redline）と呼ぶ。例えば、圧力が規定値を超えた場合にエンジンを停止する。この方式は直感的で処理が高速であるため、古くから信頼性の高い手法として用いられてきた。

レッドライン方式は、家庭のブレーカーに似ている。電気を使いすぎるとブレーカーが落ちる。限界を超えれば無条件で遮断する仕組みだ。この方式は重大な事故を防ぐのに適している。判断が単純であるため迅速かつ確実である。ロケットエンジンもこのようなフェイルセーフ遮断を基本としている。測定値が危険ラインを超えれば、直ちにエンジンを停止させる。

しかし、レッドライン方式は微弱な異常信号を見落としやすい。センサー信号には常にノイズが混入する。ノイズが大きいと、正常であるにもかかわらず警報が作動してしまう。これを誤警報と呼ぶ。誤警報が頻発すると、人間は警報を信用しなくなる。逆に、噴射器の微小な振動やシールの軽微な摩耗は閾値の範囲内に隠れてしまう。このような微弱な信号は拡大するまで顕在化せず、拡大した段階ではもはや手遅れとなる。

人工知能による診断は、この間隙を埋めることを目的とする。人間は一度に一つか二つの計器しか注視できない。人工知能は数百個に及ぶセンサー信号を一括して処理する。複数の信号の波形パターンや相互関係を総合的に分析する。そのため、測定値が限界値を超える前に異常の兆候を検知できる。2026年の航空宇宙学術誌に掲載されたある総説論文は、この動向を整理している。同論文は、液体ロケットエンジンの診断においてデータ駆動型手法が大幅に増加したと説明している。同時に、実際の故障データが極めて少ないという課題も指摘している。

要約すると、ロケットエンジンの監視には三つの壁が存在する。信号が極めて高速でノイズが多いこと、微弱な異常の顕在化が遅いこと、そして誤警報と見落としの狭間でバランスを取らなければならないことである。人工知能は、これら三つの壁を同時に克服しようとする試みである。次節から、その手法を一つずつ具体的に見ていく。

人工知能による監視がレッドライン方式を完全に無くすわけではない。両者は併用される。レッドラインは重大事故を阻止する最後の防衛線である。人工知能はその手前で微弱な兆候を事前検知する。多層的に構築された安全網である。外側の網が見落とししたものを内側の網が捕らえる。ロケットの安全性はこのように複数の手法を重層化して確保されるものであり、単一の手段のみに依存することはない。

10.2 複数センサーの統合による異常の早期検知

本節で扱うこと

本節では、エンジンのセンサー信号から異常を迅速に検出する人工知能アーキテクチャを扱う。まずテレメトリという用語と超高周波信号について解説する。次に、時間の推移とチャンネル間の相関関係を同時に捉えるニューラルネットワークを紹介する。このようなニューラルネットワークを時間畳み込みアテンションネットワーク（TCAN）と呼ぶ。この構造はロケット専用として確立されたモデルではなく、多様な分野で広く用いられている手法である。最後に、こうした診断技術が依然として抱える課題についても触れる。

まず用語を整理する。テレメトリ（telemetry）とは、遠隔地にある装置の状態を信号として送受信する技術のことである。エンジンには圧力、振動、温度、流量を測定するセンサーが取り付けられている。これらのセンサー値がリアルタイムでコンピュータに入力される。超高周波とは、この信号を極めて微小な時間間隔でサンプリングすることを意味する。あるセンサーは1秒間に数万回から数十万回もの計測を行う。このように高頻度でサンプリングして初めて、高速な振動を捉えることができる。

圧力計測センサーには圧電素子が用いられる。圧電素子は圧力を受けると微小な電気を発生する物質である。圧力が急激に変化すれば、電気信号も即座に変化する。そのため、このセンサーは急激な圧力変動を的確に捉える。加速度計は部品の振動の大きさを測定する。これら二つのセンサーを併用することで、圧力と振動を同時に観測できる。エンジンの状態を多角的に把握できるわけである。

サンプリング速度の遅い監視では、急速な異常を見落とししてしまう。旧式のカメラでハチドリの羽ばたきを撮影する場合を考えてみよう。シャッタースピードが遅ければ、羽はブレて不鮮明になってしまう。高速シャッターであって初めて、羽の一瞬の動きを捉えることができる。センサーも同様である。サンプリング間隔が粗ければ、高速な振動成分は消失してしまう。したがって、危険な高周波振動を検知するためには高頻度で読み取らなければならない。

なぜこれほど高速な監視が必要なのかを見てみよう。ロケットエンジンの異常は瞬く間に拡大する。噴射器付近で圧力が規則的に振動する現象が存在する。これをチャギング (chugging) と呼ぶ。低周波でエンジン全体が激しく脈動する現象である。悪化するとバルブや配管が激しく揺れて破損に至る。このような振動は瞬時に成長する。人間が目視で確認して対応するにはあまりにも速すぎる。そのため、機械が代わりにミリ秒単位で判断を下さなければならない。

ある部品の異常が、別の部品の信号として先行して現れることもある。例えば、まずターボポンプの回転軸が振動し始める。その振動が少し遅れて燃焼室圧力の変動として現れる。人間がこのような時間遅れと因果関係を一目で把握することは困難である。ニューラルネットワークは複数のセンサーを一括して処理するため、こうした時間遅れやチャンネル間の相関関係を学習することができる。

ここで紹介するアーキテクチャは、二つの手法を統合したものである。一つは時間畳み込みである。時間畳み込みは、信号の時間的推移から特徴的な波形パターンを抽出する手法である。短いウィンドウから長いウィンドウへと受容野を広げながら長期的な推移を捉える。もう一つはアテンション (attention) である。アテンションは、多数の信号の中でどこに重点を置くべきかを決定する手法である。現在重要度の高いチャンネルにより大きな重みを割り当てる。これら二つの手法を組み合わせることで、過渡的な微小振動とチャンネル間の相関関係を同時に分析できる。この結合アーキテクチャを時間畳み込みアテンションネットワーク (TCAN) と呼ぶ。

時間畳み込みが長い流れを見る仕組みを、もう少し詳しく説明する。畳み込みは信号を小さな窓で走査する手法である。窓が狭ければ短い瞬間しか見られない。ロケットの異常は長い時間をかけて現れることもある。そのため広い時間幅を見る必要がある。このときに使われる手法が窓の間隔を広げることである。これを拡張畳み込みと呼ぶ。値を1つ飛ばして見ながら広い時間を走査する。階段を2段ずつ跳び上がれば、同じ歩数でより高く行ける理屈である。こうすれば少ない計算量で長い流れを見ることができる。

アテンションが注意を配分する方法も例に挙げる。騒がしい教室で友人の声を選んで聞き取る場面を思い浮かべる。耳は多様な音の中から重要な音に集中する。アテンションも同じ働きをする。今、異常を明確に示しているチャンネルに重みを置く。状況が変われば重みも変わる。そのため、多数のセンサーの中から重要な信号をその都度選んで見る。時間畳み込みが時間の流れを見つめ、アテンションがチャンネルを選ぶ。

この結合方式は最近の研究で広く用いられている。2025年のある研究は、アテンションを加えた時間畳み込みニューラルネットワークを提案している。この研究は、短い依存性と長い依存性を同時に捉えると説明している。同年の別の研究は、時間畳み込みとグラフアテンションを結びつけている。複数のセンサーをグラフと見なし、その関係性を併せて学習する。これらの研究はロケット専用ではない。しかし、複数センサーの異常を同時に検出する問題によく適合する。ロケットエンジンの診断も、複数センサーの異常を同時に検出すべき同種の問題である。検証されているのは、一般的な時系列データにおいてこの構造が異常を良好に検出できたという点である。ロケットのセンサーや故障類型にそのまま通用するという実証はまだない。本書は、この構造をロケット診断に応用する方向性として提案する。

ロケット分野の他の研究も同様の方向性を示している。複数のセンサー信号を併せて読み取るディープラーニング診断が増えている。2022年のある研究は、解釈可能な長短期記憶ネットワークを用いている。このニューラルネットワークは、複数センサーのデータからエンジンの異常を分類する。2024年のある研究は、性質学習に基づく欠陥検出を扱っている。こうした潮流はすべて、複数の信号を結びつけて異常を迅速に検出しようとする試みである。

このような診断はどこで計算するかも重要である。信号を遠くのコンピュータに送って判断しては時間がかかる。ミリ秒単位で答えを出すには、エンジンの側で計算しなければならない。このように装置のすぐ側で計算する方式をエッジコンピューティングと呼ぶ。小型の専用チップにニューラルネットワークを組み込んで動作させる。信号を受信すると直ちにその場で判断する。そうしてこそ、危険をミリ秒単位で察知できる。そのため、診断ニューラルネットワークは小さく高速でなければならない。大規模なニューラルネットワークは高精度であっても、遅ければ有用性が低下する。

診断モデルはおおむね3つの段階を経る。まずセンサー信号を均一に整える。これを標準化と呼ぶ。センサーごとに大きさや単位が異なるためである。次に短い時間窓を切り出してモデルに入力する。最後に状態を複数の類型に分類する。正常か、センサー異常か、ポンプ異常か、燃焼振動かを見分ける。診断モデルはこれら3つの段階を非常に速い速度で絶え間なく繰り返す。

この診断が捉えようとする異常には多様な種類がある。噴射器付近で低周波の揺れを伴うチャギング（Chugging）がある。より速い振動で唸る高周波振動がある。ターボポンプのシールが摩耗して漏れが生じる問題がある。ベアリングが摩耗して振動が増大する問題もある。それぞれの異常は異なる信号パターンを残す。診断モデルはこのパターンの違いを学習する。どのようなパターンが現れるかを見て異常の種類を判別する。

ここで注意すべき点がある。この構造を扱った一部の文章は、精度や遅延時間といった数値を挙げている。しかし、その数値は公開された論文では確認されていない。確認されていない数値を事実のように記述すれば、読者を誤導することになる。したがって本書ではそのような数値を用いない。代わりに、この構造を早期欠陥診断の原理としてのみ説明する。核心は、複数のセンサーを統合して見ることで異常を早期に捉えるということにある。

実際のエンジンでは、診断結果を扱う際に故障の危険度を分類する。圧力が危険ラインを大幅に超える致命的な信号は、1つだけでも直ちにエンジンを停止させる。こうした信号に対して多重確認を強制すると、停止が遅れて事故が拡大してしまう。逆に軽微な兆候は、複数の信号が同じ異常を指し示しているときに措置を講じる。単一のモデルの誤判断によって正常な試験を台無しにしないためである。したがって、診断出力は安全ロジックと併用される。人間の監視とルールベースの安全装置が共に存在しなければならない。

診断モデルを信頼するためには、なぜそう判断したのかを知る必要がある。ニューラルネットワークは内部を見通すことが難しいブラックボックスのようなものである。答えは出すものの、理由は語らない。ロケットのように危険を伴う領域では理由が重要である。そのため、どのセンサーが判断を導いたのかを示す研究が増えている。これを解釈可能な診断と呼ぶ。人間はその理由を見て診断を信頼するかどうかを決める。理由を把握できてこそ、人工知能を安全判断に活用できるのである。

もう一つの難しさはデータが少ない点である。ロケットエンジンの実際の故障データは極めて稀である。故障はすなわち高価な事故を意味するからだ。そのため正常データは豊富にあるが、故障データはほとんど存在しない。人工知能はデータが少なければ学習が難しい。これを解決するため、研究者たちは多様な手法を用いている。1つは物理モデルによって故障状況を模擬した擬似データを生成することである。もう1つは試験用モデルにあらかじめ定めた故障を意図的に混入させることである。このように意図的に故障を投入する手順を欠陥注入と呼ぶ。擬似データの生成と欠陥注入とは意味が異なる。データ不足はこの分野の大きな課題として残されている。

あるエンジンで学習した内容を別のエンジンへと移転する方法もある。これを転移学習と呼ぶ。自転車に乗ればオートバイの乗り方をより早く習得できるのと似ている。すでに獲得した知識を新たな状況に移して適用する。そうすれば、新しいエンジンのデータが少なくても速やかに学習できる。2026年の航空宇宙学術誌の総説論文もこの困難を指摘している。実際の故障データが少なく、故障の種類が多岐にわたるという点である。この論文は、これら3つの実務的課題を中心に診断研究を整理している。

診断の目標は事故を防ぐことだけに留まらない。適切な整備を行うためにも用いられる。異常がなければ無理に部品を交換しない。異常の兆候が見られれば事前に手を打つ。このように状態を見て保全を行う手法を状態基準保全と呼ぶ。再使用型エンジンはこの方式によってコストを削減する。診断は安全性とコスト削減を両立させる道具である。

10.3 見えない燃焼室内部を描き出すデジタルツイン

本節では燃焼室内部の危険な振動を扱う。この振動を燃焼不安定性と呼ぶ。まず音と火炎がどのように互いの勢いを強め合うかを説明する。次に、目に見えない圧力の流れをコンピュータで復元する方法を見る。この手法は物理方程式を遵守するニューラルネットワークを用いる。最後に、この手法の有用性と限界を整理する。

まず用語の定義から説明する。燃焼不安定性とは、燃焼室内で圧力が大きく変動する現象である。火炎と音の呼吸が合えば、この振動は増大する。微小な圧力変動が火炎の熱放出を揺さぶる。揺さぶられた火炎が再び圧力変動を増幅させる。このフィードバックが繰り返されると、振動は雪だるま式に膨らむ。深刻な場合には燃焼室壁面や噴射器が破損する。ロケット開発の歴史において、この現象は古くからの難題である。

この振動はロケット開発の初期から大きな問題であった。人類を月に送った大型エンジンもこの問題に苦しめられた。燃焼室内で圧力が激しく共鳴し、エンジンを破壊した。研究者たちは噴射器の形状を何度も変更しながらこれを克服した。それほど燃焼振動の制御は厄介である。現在でも新型エンジンを開発するたびにこの問題が確認されている。

振動には多様な形態がある。燃焼室を円筒と仮定してみよう。音は円筒の長さ方向に共鳴することがある。円周に沿って回転しながら共鳴することもある。直径を横切るように共鳴することもある。形態ごとに振動数が異なる。どの形態が増大しているかを把握できれば対処が容易になる。したがって、振動の形態と強度を把握することが重要である。

このフィードバックを説明する古くからの原理がある。圧力が高まる瞬間に熱がより多く放出されると、振動が増幅する。この原理をレイリー（Rayleigh）基準と呼ぶ。ブランコを押す場面を思い浮かべると分かりやすい。ブランコが前へ進むときに押せば、次第に高く揺れるようになる。逆の瞬間に押せばブランコは止まる。火炎と音も同じ理屈で互いを強め合ったり鎮めたりする。いつ力をやり取りするかが、安定と不安定の分かれ目となる。

このフィードバックは、音叉とマイクの関係にも似ている。講堂でマイクをスピーカーに近づけると鋭い音が発生する。スピーカーの音マイクに入り込み、再び増幅されるためである。このフィードバックが音を雪だるま式に増幅させる。燃焼室においては火炎がスピーカーであり、音がマイクに相当する。両者の位相が一致すると、音は収拾がつかないほどに巨大化する。そのため、このフィードバックを断ち切る設計が必要となる。

問題は燃焼室内を直接見るのが難しい点である。内部は極めて高温かつ高圧である。センサーを任意の場所に設置することはできない。せいぜい壁面の数カ所に圧力センサーを取り付けるのが限界である。しかし危険な振動は燃焼室全体で発生する。壁面の数点の情報だけでは全体の様相を把握することは難しい。そのため、限られた観測から全体を描き出す手法が必要となる。

ここでデジタルツインが登場する。デジタルツインとは、実機をそのまま追従するコンピュータモデルである。実機エンジンが作動している間、モデルも同期して作動する。センサー値を受け取り、モデルを常に現実に合わせて。こうすることで、センサーが設置されていない箇所の状態も推測することができる。双子のように実機と並行して動作するモデルであることから名付けられた。

デジタルツインはカーナビゲーションと似た側面を持つ。ナビゲーションは実際の道路状況を受け取ってルートを再描画する。デジタルツインも実機エンジンの信号を受け取って状態を再描画する。異なる点は速度と精度である。ロケットのツインはミリ秒ごとに状態を適合させなければならない。そうしてこそ高速な振動に追従できる。この応答速度を達成するには、モデルを軽量化しなければならない。

壁面のわずかなセンサーから内部を把握する作業は、逆方向に解く問題である。通常は原因を知った上で結果を求める。ここでは結果である壁面の圧力しか分からない。その結果から原因である内部圧力場を逆算する。このように結果から原因を特定する問題を逆問題と呼ぶ。逆問題は解が複数存在する可能性があり厄介である。物理方程式は、これら複数の解の中から物理法則に合致する解のみを残す。

このデジタルツインの中身を構成する手法が物理ベースのニューラルネットワークである。このニューラルネットワークを物理情報ニューラルネットワーク（Physics-Informed Neural Network, PINN）と呼ぶ。今後は物理ニューラルネットワークと表記する。通常のニューラルネットワークはデータのみを見て学習する。物理ニューラルネットワークはデータとともに物理方程式も遵守するように学習する。学習時に方程式に反した場合はペナルティを与える。そのため、データが少なくても物理法則に合致した解を導き出す。

物理ニューラルネットワークの学習プロセスをもう少し詳しく見てみよう。通常のニューラルネットワークは正解との誤差のみを縮小させる。物理ニューラルネットワークは2つの要素を同時に縮小させる。1つはセンサー値との誤差である。もう1つは物理方程式への違反度合いである。これら2つのペナルティを共に引き下げるように学習する。そうすることで、センサーが存在しない位置でも出力が物理法則を遵守ようになる。データの空白部を物理法則が埋めるわけである。塗り絵において下絵の線が色を導くのと似ている。

この手法は低コストな監視ツールとなり得る。燃焼室内部を高精度に計算するには、大規模なコンピュータを長時間稼働させなければならない。試験の実施中にはそのような時間的猶予はない。物理ニューラルネットワークは一度学習を終えれば高速に解を出力する。そのため、試験を実施している最中であっても内部状態を描き出すことができる。この高速な描画によって危険な振動の兆候を捉える。試験を停止させることなく内部を透視するようなものである。

燃焼室の音の形態を記述する方程式がヘルムホルツ（Helmholtz）方程式である。この方程式は、閉じた空間内で音がどのような形態で共鳴するかを教えてくれる。管楽器の内部で特定の音がよく響く理屈と似ている。物理ニューラルネットワークはこの方程式と境界条件を遵守しながら学習する。壁面のいくつかのセンサー値を入力として受け取る。そうすると、燃焼室全体の圧力の流れを復元する。振動がどの位置で激しく生じているかを絵のように提示してくれる。

燃焼室内の音は、境界でどのように応答するかによって変化する。噴射器面やノズル喉部は音をある程度反射し、ある程度吸収する。この反射と吸収の度合いを音響境界条件と呼ぶ。物理ニューラルネットワークはこの境界条件も共に遵守しながら学習する。そうしてこそ、がらんどうの部屋の音ではなく実際の燃焼室の音を描き出すことができる。先に見たレイリー基準とこの境界条件が、ロケットの燃焼不安定性を左右するのである。

この方向性は最近の研究で活発である。物理ニューラルネットワークは音の圧力場を少ない観測から復元することに強みがある。圧力は数箇所ですら測定できず、速度はほとんど測定できないからである。2024年のある研究は、物理ニューラルネットワークによって燃焼器の熱音響相互作用を学習している。熱音響とは熱と音が複雑に絡み合う現象を指す。この研究は、圧力減衰や熱放出結合といった値をデータから見出す。2026年のある研究は、領域分割型の物理ニューラルネットワークによって燃焼室壁面の音響吸収特性を推定している。これらの研究は一般的な燃焼器の熱音響学習と境界特性の推定を扱っている。実際の液体ロケット燃焼室において、少数のセンサーで全圧力場をリアルタイム復元した実証はまだ存在しない。本書はそのようなリアルタイム復元を今後進むべき方向性として提案する。

物理ニューラルネットワークは航空宇宙推進のクリーン燃焼研究にも用いられている。2026年のある論文はこの潮流を持続可能な推進への道と捉えている。物理方程式とデータを結びつけ、燃焼をより正確に描写する。こうした研究はロケットだけでなく航空エンジンにも広がっている。物理法則を守るニューラルネットワークという考え方が様々な分野へと波及している。

デジタルツインは航空エンジンの整備において先行して活用されている。ある大型航空エンジンはデジタルツインによって複数の異常を事前に捉えた。タービンブレードの摩耗や燃焼問題を予測したと報告されている。この事例は、監視モデルが実際に有用であることを示している。ロケットエンジンは航空エンジンよりも環境が過酷であり、データも少ない。そのため、この手法をロケットへと適用するにはさらなる検証が必要である。

物理ニューラルネットワークにも弱点はある。方程式を学習に組み込むと訓練が難しくなる。物理ペナルティとデータペナルティの重みを適切に調整しなければならない。重みのバランスが崩れると解が一方に偏ってしまう。複雑な燃焼を扱うほど、この調整は困難になる。したがって物理ニューラルネットワークは万能ではない。課題に応じて方程式と構造を選定する必要がある。この選定には依然として人間の知見が求められる。

より広い視野で見れば、物理情報に基づく機械学習は燃焼研究全般で急速に発展している。2025年に発表されたある総合論文はこの流れを整理している。この論文は燃焼化学、反応流、その他の多様な課題に分けて説明している。物理知見を学習に組み込めば、データが少なくても解が物理法則に整合すると捉えている。2026年

の別の総合論文は、航空宇宙推進の乱流燃焼に焦点を当てている。物理の厳密性とデータの力を融合させると説明している。

この手法の利点は、データと物理法則を併用する点にある。センサーが少なければデータだけで空白を埋めることは難しい。物理方程式がその空白を補完してくれる。そのため、安価なセンサー数個だけでも全体の状態を描写できる。監視用として高速に動作させられる点も極めて有用である。

限界も明確である。火炎反応と乱流は極めて複雑である。ヘルムホルツ方程式は音を簡略化した縮約モデルである。実際の燃焼のあらゆる詳細を網羅できるわけではない。そのため、このデジタルツインは高速な監視用として用いられる。精密な判断は高忠実度解析や実機試験で補完しなければならない。特定の周波数や圧力振幅といった詳細な数値は、公開された論文では確認されていない。したがって本書ではそのような数値を扱わない。代わりに、この手法がどのように機能し、どこに有用性があるのかという原理のみを説明する。

デジタルツインが適切に機能するためには、実機と常に同期させ続けなければならない。モデルが実機から徐々に乖離すると描写が狂ってしまう。そのため、センサー値を用いてモデルを絶えず補正する。この補正が遅ればツインは実態を見失う。補正が頻繁すぎるとノイズにまで追従して不安定になる。この間のバランスを取ることが技術の要となる。優れたツインは実態を見失わず、ノイズにも惑わされない。

燃焼振動を抑制する方法は監視だけにとどまらない。音を吸収する構造を壁面に組み込むこともある。この構造を音響吸音装置と呼ぶ。インジェクターの配置を変更してフィードバックを遮断することもある。人工知能による監視は、こうした設計を支援するツールである。どのような条件で振動が成長するのかを事前に知らせてくれる。設計と監視が両輪となって初めて振動を制御できる。

10.4 エンジンの経年劣化と個体差の計測法

本節では、エンジンの経年劣化や個体差に関する課題を扱う。まず再使用エンジンがなぜ少しずつ変化するかを説明する。次に、その変化の不確実性を計測する方法を見る。この手法は、解とともに解の幅も出力するニューラルネットワークである。最後に、なぜこの不確実性が安全性にとって重要であるのかを論じる。あらかじめ断っておく点がある。ここで挙げる研究は一般的な機械の寿命予測である。ロケットエンジンのデータで検証されたものではなく、ロケットへの適用は今後の可能性である。

再使用エンジンは同一のエンジンを何度も使用する。紙コップを一度使って捨てる方式から、陶器のカップを何度も使う方式に変わるようなものである。この方式は宇宙輸送のコストを大幅に引き下げる。しかし、使用するたびに部品は少しずつ摩耗する。インジェクター表面が摩耗する。タービンブレードが侵食される。冷却流路が熱疲労によって変形する。このように時間の経過とともに性能が変化する現象を経年劣化と呼ぶ。

もう一つの変数は製作誤差である。同一の図面で作製しても実際の寸法はわずかに異なる。部品ごとに微細な誤差が存在する。この誤差によってエンジンごとに応答が異なってくる。経年劣化と製作誤差が重なるとエンジンの個性が生じる。同一のバルブ指令を与えてもエンジンごとに結果がわずかに異なるため、制御器はこの差異を把握していなければならない。

この変化はエンジンの性能に直接影響を及ぼす。摩耗や侵食は推力を徐々に低下させる。推力が低下すればロケットの軌道が変わる。燃焼がどれほど充実して行われているかも変化する。この燃焼の充実度を表す指標として特性排気速度がある。この値が低下すると、同一の推進剤であっても生み出せる推力が減少する。そのため、劣化や誤差を事前に計測しておくことが重要となる。

特性排気速度という用語について少し補足しておく。この値は燃焼室がどれほど効率よく燃焼しているかを示す指標である。燃焼室圧力、ノズルスロット断面積、推進剤の流量によって定まる。ノズルが実際に噴出する排気速度やノズル効率とは異なる値である。純粋に燃焼が適切に行われている度合いのみを測る尺度である。この値が高ければ燃焼が優れており、低ければ推進剤が十分に燃焼していないことを意味する。インジェクターが摩耗すると混合が悪化し、この値が低下する。したがって、この値の変化からエンジンの健全性を把握することができる。

この変化は長く履いたスニーカーに例えることができる。新しいスニーカーは靴底がしっかりしている。長く履き続けると靴底がすり減って滑りやすくなる。同じ力で走っても思うように進まない。エンジンも使えば使うほど性能が少しずつ低下する。問題はその低下度合いがエンジンごとに異なる点である。あるエンジンは早くすり減り、別のエンジンはゆっくりすり減る。そのため、エンジン一つひとつの状態を個別に確認しなければならない。

経年劣化の度合いを把握することは安全な再使用の鍵である。状態を把握できなければ二つの過ちを犯すことになる。まだ十分に使用できるエンジンを過剰に早く廃棄してしまう可能性がある。これは無駄である。逆に、すでに限界を迎えたエンジンを無理に使用してしまう恐れもある。これは事故につながる。状態を正確に把握していれば、エンジンを使える限界まで活用しつつ危険域は越えないため、双方の過ちを回避できる。

ここで変分ベイズニューラルネットワークが用いられる。英語では Variational Bayesian Neural Network である。以降はベイズニューラルネットワークと表記する。通常のニューラルネットワークは一つの解のみを出力する。例えば、推力低下が3パーセントであると確定的な一つの値で答える。ベイズニューラルネットワークは解の範囲もともに出力する。推力低下が2パーセントから4パーセントの間である可能性が高い、というように解と確信度を併せて提示してくれる。

ベイズニューラルネットワークが幅を出力する仕組みを分かりやすく説明する。一人だけに尋ねる代わりに、複数人に意見を求めるとしよう。全員の答えが似通っていれば確信度は高い。答えがまちまちであれば確信度は低い。ベイズニューラルネットワークは、こうした多様な意見を一つのモデルの中に包含している。そのため、解の中央値とばらつきの幅を同時に出力する。幅が狭ければモデルの確信度が高く、幅が広がればまだ十分には把握できていないことを意味する。

不確実性には二つの種類がある。一つはデータそのものの揺らぎに起因する。センサーノイズのように除去できない揺らぎである。もう一つはモデルの学習不足に起因する。未知の状況において増大する。新たなパターンの劣化に初めて直面した際、この不確実性は大きくなる。これら二種類を区別して捉えることで対応が容易になる。データをさらに集めるべきか、追加試験を行うべきかを判断できる。

ベイズニューラルネットワークは通常のニューラルネットワークよりも学習が困難である。単一の解ではなく解の分布を学習しなければならないためである。この分布を厳密に求めるには莫大な計算量を要する。そこで研究者たちは近似手法を用いる。分布を扱いやすい形状に変換して学習させる。この手法を変分推論と呼ぶ。名称にある「変分」はこの近似に由来している。近似を用いるため、結果は必ず実測データで検証しなければならない。

劣化予測はロケットだけの課題ではない。航空機エンジン、風力発電機、工場の産業機械も同様の課題を抱えている。いずれも長期にわたって使用される機械であるためである。そのため、この分野の研究は相互に行き来している。他の機械で成功した手法をロケットへと移植する。ロケットの過酷な条件が新たな手法を生み出すこともある。このように分野間で手法を共有し合うことで、技術はより急速に進歩する。

この確信の度合いを不確実性と呼ぶ。不確実性を把握することは安全性において重要である。モデルが確信を持って回答している時と、よく分かっていない時とでは扱いを変えなければならない。モデルが分からないと示したならば、人間はより慎重になる。安全マージンをより大きく確保する。追加試験によって確認を行う。天気予報で降水確率を知らせてくれる理屈と同じである。確率が半々であれば傘を用意し、天気の推移を見守る。

この方向性は様々な分野で急速に発展している。部品の余寿命を予測する研究がその代表例である。余寿命は残存耐用期間とも呼ばれる。2024年のある研究は、ベイズニューラルネットワークによってこの寿命を予測している。解を単一の値ではなく確率分布として出力する。2025年のある研究は、ベイズ再帰型ニューラルネットワークによって複数の不確実性を同時に扱っている。これらの研究はロケット専用ではない。しかし、劣化していく機械の状態を扱うという問題意識は共通している。ロケットエンジンの劣化予測にも同様の着想を適用できる。

この手法が広く検証されてきた対象として航空エンジンのデータがある。研究者たちは公開されたエンジンの劣化データを用いて手法の性能を競い合う。同一のデータを用いて複数の手法による予測を比較する。こうすることで、どの手法がより優れているかを評価できる。ロケットのデータは少ないものの、こうした公開データによって基盤を固める。確立された手法を後からロケットデータへと適用して検証する。

制御器はこの不確実性情報を受け取って判断を下す。不確実性が大きければ保守的に運用する。推力設定をやや抑えたり、マージンをより大きく確保したりする。不確実性が小さければ性能を最大限に引き出す。このようにすれば、エンジンの状態に合わせて運用することが可能となる。固定された単一の規則ですべてのエンジンを一律に扱う方式よりも安全である。

不確実性情報は整備の判断にも用いられる。モデルが劣化を高い確信度で予測できれば計画を立てやすい。モデルの確信度が低い場合は、部品を分解して直接点検する。こうすることで当てずっぽうな整備を減らすことができる。状態を把握した上で整備するため部品を無駄にせず節約できる。同時に危険な部品を見逃すこともない。不確実性を知ることが、コスト削減と安全性の維持を両立させる。

限界も存在する。人工知能が確率を出力したからといって、その確率が自動的に正しいわけではない。モデルが誤った学習を行えば、誤った確信を与えてしまう。そのため、実機試験データによって補正および検証を行わなければならない。モデルが出力した不確実性が実際の誤差と合致しているかを確認する作業である。この検証を経ていない確率は信頼性に欠ける。ロケットのようにリスクの高い分野では、この検証は一層厳格でなければならない。詳細な信頼区間などの数値は公開された論文では確認されていない。したがって本書ではそのような数値を記載しない。代わりに、不確実性を定量化する思考の枠組みのみを解説する。

10.5 複数のバルブを同時に制御する強化学習制御（LUMEN、DLR P8.3）

本節では、エンジンの複数バルブを協調して調節する高度な制御を扱う。まず強化学習とは何かを説明する。次に、ロケットエンジンの制御がなぜ困難であるのかを見る。続いてドイツにおける実際の実験事例を紹介する。最後に、この技術を飛行実証へと適用するまでに残された課題を論じる。

強化学習は試行錯誤を通じて学習する手法である。赤ん坊が歩行を覚える様子と似ている。転べば罰を、上手に歩ければ報酬を得ると考えればよい。望ましい行動には報酬を与え、望ましくない行動にはペナルティを与える。何度も試行を重ねることで、報酬を最大化する手法を探索する。ここにニューラルネットワークを組み合わせた手法を深層強化学習（Deep Reinforcement Learning、DRL）と呼ぶ。以降は深層強化学習と表記する。

強化学習では二つの心が衝突する。一つはすでに知っている良い方法を使おうとする心である。もう一つは新しい方法を試してみようとする心である。常に知っていることばかり使っていては、より良い道を見つけられない。常に新しいことばかり試していては危険であり、迷走してしまう。そのため、両者の間のバランスが必要となる。このバランスは、新しいものを探す心と知っているものを活用する心の綱引きと見ることができる。学習の初期には多くの試行を行い、進むにつれて知っていることを活用する。

ロケットでは、この試行錯誤を実機エンジンで行うことはできない。エンジンを壊しながら学ぶわけにはいかないからである。そのため、まずはコンピュータ内のモデルで学習する。このモデルをシミュレータという。シミュレータの中であれば、数千回失敗しても問題ない。思う存分試行しながら優れた制御を探索する。ゲームを何回もプレイしてコツを掴むのと同様である。

ロケットエンジンの制御がなぜ難しいのかを見てみよう。エンジン内部の諸数値は互いに複雑に絡み合っている。酸化剤バルブを開くと圧力が上昇する。圧力が上昇するとターボポンプの回転が変化する。燃料と酸化剤の比率も連動して変動する。この比率を混合比という。一つの値を動かすと、他の値が次々と連動して変化する。そのため、バルブを一つだけ単独で調整することはできない。複数の値を同時に扱う制御が必要となる。

着陸するロケットにおいては、この制御がさらに難しくなる。ロケットが再び降下するには、推力を大幅に絞らなければならない。最大推力の3分の1以下にまで下げることもある。このように推力を広範囲に調整することをディープスロットリング（deep throttling）という。深く絞り込むという意味である。この際にも混合比

は適切に維持しなければならない。混合比が狂うと燃焼が悪化し、部品が損傷する。複数の値を同時に、迅速に、かつ安全に合わせなければならない。

ドイツ航空宇宙センターがこの問題を実機エンジンで研究している。ドイツ航空宇宙センターを略してDLRという。DLRはLUMENという実験用エンジンを製作した。LUMENは液体酸素とメタンを使用するポンプ式エンジンである。推力は25キロニュートン級である。小型ロケットエンジンに相当する規模である。このエンジンは2024年3月にP8.3試験台で初めて稼働した。P8.3はDLRランプホルツハウゼンにある試験施設である。LUMENは再使用エンジン技術を試験する場である。状態監視と高度な智能制御を併せて研究している。

LUMENは特定のサイクル方式を採用している。この方式をエキスパンダーブリードという。冷却流路で加熱された燃料の一部でタービンを駆動する方式である。この方式は構造が比較的シンプルで安全である。そのため、多様な技術を試験するのに適している。LUMENは産業界と研究所が共同で活用するオープンな試験台である。新たな制御手法を実機エンジンに適用して試すことができる。

P8.3試験台は2021年から稼働を開始した。この試験台は以前の施設を拡張して構築された。かつては燃焼室のみしか試験できなかった。P8.3はエンジン全体およびターボポンプまで試験する。そのため、制御手法を実際の条件下で検証することができる。LUMENとP8.3は人工智能制御研究の基盤となる。

DLRはこのエンジンに人工智能制御を適用している。DLRの公式資料は、ニューラルネットワークによって冷却流路の熱伝達をモデル化していると説明する。人工智能制御によって推力を調整し、燃焼不安定性を監視することを明らかにしている。2025年に発表されたカイ・ドレッションアの博士学位論文はこの研究を詳細に扱っている。同論文は深層強化学習によってロケットエンジンを制御している。その結果を従来のモデル予測制御と比較している。複数の変数を同時に制御し、平均誤差約1.3パーセントを達成したと報告している。この数値はドレッションアの論文が提示した結果である。シミュレーションおよび試験台研究から得られた値であり、完全なエンジンの全運転領域を飛行において実証した値ではない。

DLRは先行研究においてニューラルネットワーク制御を実試験に適用した。2023年にはLUMENのターボポンプ試験においてニューラルネットワーク制御を検証した。冷却流路の熱伝達をニューラルネットワークでモデル化する研究も推進した。2024年にはLUMENのコンポーネント試験結果と進捗状況を発表した。こうした研究の積み重ねが実機エンジンの制御へとつながっている。単発の成功ではなく、長年にわたる蓄積の成果である。

制御器が状態と行動を扱う枠組みをもう少し詳しく見てみよう。制御器は毎瞬間の状態を読み取り、行動を出力する。その行動が次の状態を生み出す。次の状態において再び行動を出力する。このプロセスが絶え間なく続く。このように状態と行動が連鎖する問題を逐次的意思決定問題という。強化学習はこの逐次的意思決定を扱うのに適している。単発の判断ではなく、連続する判断の流れを学習する。

強化学習制御器がどのように判断するのか、その原理を見てみよう。制御器はまずエンジンの状態を読み取る。燃焼室圧力、バルブ位置、ポンプ回転数、温度といった値である。これらの値を状態と呼ぶ。制御器は状態を見てバルブをどれだけ動かすかを決定する。この動作を行動という。行動の結果が良ければ報酬を、悪ければペナルティを受ける。目標推力に近ければ報酬を与える。混合比が狂ったり振動が大きくなったりした場合はペナルティを与える。この信賞必罰を定めたルールを報酬関数という。制御器は報酬を多く受け取る方向へとバルブ操作を洗練させていく。

報酬関数を適切に構築することが制御の成否を分ける。信賞必罰のルールが目標をそのまま反映していなければならない。推力だけに報酬を与えると、制御器は振動を無視してしまうおそれがある。そのため、推力、混合比、振動を併せて信賞必罰に組み込む。バルブを過度に急激に動かすことに対してもペナルティを与える。急激な操作は部品に過度な負荷をかけるためである。複数の目標に対する重みを適切に調整しなければならない。この重み調整こそが制御設計の中核作業である。

産業現場においても再使用エンジンの自動運転が話題となっている。ある米国企業の最新エンジンは反復再使用を目指している。このエンジンは部品を削減し、製造しやすいように改良されたと伝えられている。遮熱シールドをなくすことで重量と複雑さを低減したという。こうした変化は、エンジンを高頻度で運用し迅速に整備しようとする流れである。ただし、これは企業の開発事例である。学術的に検証された性能値ではない。本

書ではこうした事例を動向の参考としてのみ挙げる。

この手法の強みは、複雑に絡み合った問題を丸ごと一括して扱える点にある。人間がバルブごとに手作業でルールを構築することは困難である。各数値が互いに連動しているため、ルールが複雑化する。強化学習は絡み合った関係性をデータから自律的に学習する。複数の数値を同時に考慮しながらバランスポイントを見出す。ただし、一度学習した制御器が、未経験の経年劣化に対して自動的に適合するわけではない。エンジンの変化に対応するアプローチにはいくつかある。状態を事前に読み取って制御に反映させる方法がある。変化が生じても乱されないようにするロバスト制御がある。新たなデータを用いて制御器を再学習させる方法もある。運転中に学習を行うオンライン適応は、未検証の制御変化という新たなリスクを生じさせる。したがって、どのアプローチを採用するかは安全性を吟味して決定する。

強化学習制御は従来の手法と比較検討することができる。長年用いられてきた手法としてモデル予測制御がある。この手法はエンジンの数式モデルに基づいて将来を予測し、バルブ開度を決定する。正確なモデルが存在すれば良好に機能する。しかし、エンジンが老朽化したりモデルにズレが生じたりすると性能が低下する。強化学習はデータから直接学習するため、こうした変化に対して柔軟である。両手法にはそれぞれ一長一短がある。そのため、研究者たちは両者を比較し、組み合わせて活用している。

混合比を適切に維持することがなぜ重要であるかを見てみよう。燃料と酸化剤の比率がまさに混合比である。火炎温度は通常、燃料と酸化剤が過不足なく反応する化学量論比の近傍で最高となる。この比率から外れると、燃料が過剰であれ酸化剤が過剰であれ温度は低下する。ロケットでは意図的に燃料をやや多めにして運転することが多い。壁面に接触する火炎温度を下げて燃焼室壁面を保護するためである。しかし、燃料を過剰に投入しすぎると推力が低下する。ケロシン系燃料ではこの際に煤が発生する。水素を使用するエンジンでは煤はほとんど発生しない。このように、最適な混合比は推進剤の組み合わせごとに異なる。そのため、推力を変更している間も混合比を維持しなければならない。複数の値を同時に適合させる制御が必要とされる理由がここにある。

ここで数値の扱いには慎重を期す。迅速なディープスロットリング時間や混合比の誤差範囲、振動低減率といった詳細な性能値は、公開された論文では確認されていない。確認されていない性能値を用いると事実を誇張することになる。そのため、本書ではそのような数値を用いない。確認されている数値は、多変数制御における平均誤差約1.3パーセントである。この値のみを根拠とする。

この平均誤差1.3パーセントが意味するところを整理しておく。この値は複数の変数を同時に適合させた結果である。単一ではなく、複数の目標を同時に満たしたことを意味する。人間が手作業で構築したルールでは、このバランスを保つことは困難である。人工知能が複雑な相互関係を学習し、バランスポイントを見出したのである。ただし、この値は特定研究の限定された条件下で得られた結果である。あらゆるエンジンにそのまま適用できる数値ではない。条件が変化すれば再確認が必要となる。

この技術を実際の飛行エンジンに直接適用するには、まだ道半ばである。強化学習制御器はまずシミュレーション環境で学習する。コンピュータ内部であれば失敗しても危険はない。次にハードウェアを接続して試験を行う。この試験をハードウェア・イン・ザ・ループ試験という。実際の部品とニューラルネットワークを連動させて動かしてみる。続いて地上燃焼試験によって安全性を確認する。これらすべての段階を通過して初めて飛行への適用が議論される。ロケットの認証は極めて厳格だからである。

ここで直面する大きな難点の一つが、シミュレータと実機とのギャップである。コンピュータモデルは実機エンジンと完全に同一ではない。モデル上で適切に学習した制御が、実機ではズレを生じさせる可能性がある。この差異をシミュレータと現実のギャップと呼ぶ。このギャップを埋めるためには、モデルをより精緻に構築しなければならない。実試験のデータを用いてモデルを継続的に修正・改良する必要がある。LUMENのような試験台がこの修正作業に活用される。実データがあってこそ人工知能を信頼することができる。

もう一つの原則は、安全装置を多重に設けることである。強化学習制御器が異常な指令を出力する可能性もある。そのような事態に備え、ルールベースの安全装置を併設する。制御器の指令が危険水準を超えた場合、安全装置がそれを阻止する。人工知能は性能を引き上げ、ルールは安全の下限を守る。この二重の保護があって

こそ、実機エンジンに人工知能を適用することができる。

バルブにも物理的な限界が存在する。バルブは規定された速度を超えて速く開閉することはできない。この最大速度をバルブ駆動速度限界という。人工知能がこの限界を超える急激な指令を出すと、配管に衝撃が加わる。液体が急激に停止して管壁を叩く水撃作用（ウォーターハンマー現象）がその一例である。そのため、制御器の指令はバルブが出せる速度範囲内に制限される。また、人工知能の動作が不安定になった場合に、即座に古典制御器へと切り替える安全切替機構を設ける。古典制御器は長年検証されてきたルールによってエンジンを安全に防護する。

強化学習制御の価値は再使用において明確になる。一つのエンジンを繰り返し使用すると、状態は毎回変化する。固定された制御ルールではこの変化に追従できない。強化学習制御器は状態を読み取り、それに応じてバルブを調整する。老朽化したエンジンは老朽化したなりに、新品のエンジンは新品なりに適切に扱う。この柔軟性が再使用ロケットのコストを低減させる。そのため、世界各国の研究機関がこの研究に注力している。

ただし、人工知能制御は現時点ではまだ地上試験の段階にある。実際の飛行エンジンに広く実用化されているわけではない。飛行認証には長期間の試験と実績の記録が求められる。新たな制御技術がいかなる状況下でも安全であることを証明しなければならない。この証明には膨大なデータと時間が必要となる。そのため、人工知能制御は現在、実験室や試験台において発展を遂げている最中である。その成果が蓄積されることで、いつか飛行実用化へと結実する。

10.6 結論および今後の展望

本節では、前述の4つの技術がどのように一つに統合されるのかを見ていく。続いて、この統合がなぜ再使用ロケットの時代に必要なのかを整理する。最後に、人工知能によるエンジン管理に不可欠な安全原則を提示する。

液体ロケットエンジンの知能型運用は、4つの技術をつなぐ。センサ診断は複数の信号を包括的に分析して微弱的な兆候を早期に捉え、初期異常を発見する。デジタルツインは物理方程式を遵守するニューラルネットワークによって、直接見えない内部の圧力の流れを復元する。ベイズモデルは経年劣化や個体差の不確実性を定量化し、推定値とともにその幅を出力する。強化学習制御器は複数のバルブを連動して調整し、複雑に絡み合った数値のバランスポイントを見出す。

これら4つの技術は互いにデータをやり取りする。診断が異常を発見すれば制御器が対応する。デジタルツインが内部状態を提示すれば診断の精度が向上する。ベイズモデルが不確実性を提示すれば制御器はより慎重に制御する。このように4つの技術が単一のループとして連動する。エンジンが自ら状態を監視し、自律的に調整を行う構造である。この構造を自律ヘルスマモニタリングと呼ぶ。

これら4つの技術は互いの弱点を補い合う。診断だけでは異常の正確な原因を知ることは難しい。デジタルツインが内部を示せば原因が明確になる。制御器だけではエンジンの経年劣化を知ることはできない。ベイズモデルが不確実性を知らせることで制御が安全になる。ある技術の隙間を別の技術が埋める。そのため、これらを個別に扱うのではなく一つに統合する。統合されて初めて自律管理が完成する。

この潮流はまだ完成された製品ではない。大部分が研究と試験の段階にある。多くの結果は査読を経ていない初期研究でもある。そのため、成果を断定して語るには時期尚早である。本書はその点を明確にしている。現在は技術の骨格と方向性を理解する段階である。実際の飛行エンジンに広く使われるようになるまでには、さらに時間が必要である。

この流れは再使用ロケットの時代に不可欠である。1基のエンジンを何度も使えば、毎回状態が変化する。固定されたルールだけではあらゆる変化に対応することは難しい。人間が毎回手作業で調整するには、値の変化が速すぎ、複雑に絡み合っている。人工知能はこの変化を迅速に読み取って対応するツールである。宇宙輸送のコストを下げるには、この自律管理が不可欠である。

しかし、人工知能による制御には必ず制限装置がなければならない。一つは説明可能性である。モデルがなぜそのように判断したのかを人間が理解できなければならない。もう一つは独立検証である。モデルの判断を別の方法で再確認しなければならない。残りの一つは失敗時における安全状態への移行である。モデルが不安定になっても、エンジンは安全に停止できなければならない。これら3つの装置がなければ、人工知能にエンジンを委ねることは難しい。

人工知能はエンジンを代わりに信頼するためのツールではない。人工知能はエンジンをより詳細に見るためのツールである。人間は人工知能の目を借りてエンジンをより深く理解する。最終的な判断と責任は依然として人間にある。この原則の上で、人工知能はロケットをより安全で低コストにする。

まとめ

本章の核心を改めて整理する。液体ロケットエンジンは極めて高速で高温、かつ危険な機械である。このエンジンを安全に運用するにはリアルタイムの監視と制御が必要である。従来のしきい値方式では、わずかな異常を見落としやすい。人工知能は複数のセンサーを同時に捉えてこの隙間を埋める。値が危険ラインを超える前に、わずかな兆候を読み取ろうとするものである。

早期診断は時間の推移とチャネル間の関係を併せて分析する。時間畳み込みとアテンションを組み合わせた構造が代表的である。この構造は複数のセンサーから異常を早期に発見する。判断はエンジンの傍にある小型チップ上でミリ秒以内に完了しなければならない。ただし、ロケット専用の性能数値はまだ確認が難しい。そのため、本書では原理のみで説明している。診断は人間の監督およびルールベースの安全装置と併用する。

デジタルツインは見えない燃焼室の内部を描き出す。物理方程式に従う物理ニューラルネットワークを用いる。壁面の数個のセンサーだけで圧力場全体の流れを復元する。燃焼不安定性の監視に大いに役立つ。ただし、複雑な火炎のすべてを捉えきれわけではない。迅速な監視用として使い、精密な解析で補完する。デジタルツインは実際の信号によって絶え間なく補正されてこそ真価を発揮する。

ベイズニューラルネットワークは経年劣化や個体差による不確実性を測定する。予測値とともにその幅を出力する。幅が狭ければ確信度が高いことを意味し、広ければよく分からないことを意味する。この情報は制御器が慎重を期すべきかを判断する際に用いられる。整備をいつ行うかを決定する際にも使われる。ただし、モデルが示す確率は実際のデータで検証しなければならない。

強化学習制御器は複数のバルブを協調して調整する。ドイツDLRIはLUMENエンジンとP8.3試験設備においてこれを研究している。公開資料では多変数制御の平均誤差約1.3パーセントが報告されている。詳細な性能数値の一部は確認が不十分であるため記載を見送っている。この技術を実際の飛行に用いるには、多くの段階にわたる検証が残されている。

本章を貫く一つの原則を改めて確認する。人工知能は性能を引き上げるツールである。しかし、安全はルールと人間が守る。この二重の構えが揃って初めて、実際のエンジンに人工知能を適用できる。検証されていない数値は信じない。初期研究と検証済みの成果を区別して読み解く。この姿勢こそが、ロケットのように危険な技術を扱う正しい道である。

これら4つの技術が一つに統合されれば、エンジンが自ら健全性を保つようになる。4つの技術は互いにデータをやり取りしながら、一つのループとして機能する。この自律管理は再使用ロケット時代の基盤である。1基のエンジンを何度も使えば状態が毎回変わるためである。しかし、安全のために説明可能性と独立検証、安全移行装置が備わっていなければならない。

本章で見てきた技術は、それぞれ異なる問いに答えている。診断は「今、何に問題が生じているのか」を問う。デジタルツインは「見えない内部がどうなっているのか」を問う。ベイズモデルは「この判断をどれほど信じるべきか」を問う。制御器は「それでは何をすべきか」を問う。4つの問いが集まることで、エンジンの状態と対応策が一つにつながる。優れた人工知能エンジン管理は、これら4つの問いを包括的に扱う。

最後に、本章の資料に対するスタンスを明らかにしておく。本章で取り上げた最新研究の相当数は初期段階にある。多くの論文は査読を経ていない事前研究である。企業のエンジン事例は産業界の潮流を示しているにすぎない。学術的に検証された成果とは重みが異なる。そのため、本章では確認された数値と原理に重きを置いた。確認できなかった数値は削ぎ落とした。読者が技術の方向性を正しく理解することを願っている。人工知能はロケットをより安全で低コストにする長い旅路のツールである。

関連根拠資料

- Yang, S., Wu, J., Xie, C., Zhong, Z., Cheng, Y., Wang, B., Liu, Y., & Lu, J. (2026). Data-Driven Intelligent Fault Diagnosis: A Review from the Perspectives of Three Practical Issues in Liquid Rocket Engines. *International Journal of Aeronautical and Space Sciences*, 27(4), 3438-3463. <https://doi.org/10.1007/s42405-026-01131-9>
- Wang, T., Ding, L., & Yu, H. (2022). Research and Development of Fault Diagnosis Methods for Liquid Rocket Engines. *Aerospace*, 9(9), 481. <https://doi.org/10.3390/aerospace9090481>
- Deng, L., Cheng, Y., & Shi, Y. (2022). Fault Detection and Diagnosis for Liquid Rocket Engines Based on Long Short-Term Memory and Generative Adversarial Networks. *Aerospace*, 9(8), 399. <https://doi.org/10.3390/aerospace9080399>
- Urgolo, A., Pill, I., Waxenegger-Wilfing, G., & Freiberger, M. (2024). Property Learning-Based Fault Detection for Liquid Propellant Rocket Engine Control Systems. *OASlcs*, 125, 15:1-15:20. <https://doi.org/10.4230/OASlcs.DX.2024.15>
- Waxenegger-Wilfing, G., Dresia, K., Deeken, J., & Oschwald, M. (2021). Machine Learning Methods for the Design and Operation of Liquid Rocket Engines: Research Activities at the DLR Institute of Space Propulsion. *arXiv*. <https://arxiv.org/abs/2102.07109>
- NASA. (2009). Distributed Health Monitoring System for Reusable Liquid Rocket Engines. NASA Technical Reports Server. <https://ntrs.nasa.gov/api/citations/20090040299/downloads/20090040299.pdf>
- Wang, C., Liu, Q., Qu, L., Chang, W., Wang, T., Duan, P., & Cao, Y. (2025). Self-attention-enhanced Temporal Convolutional Networks for Anomaly Detection in Time Series. *Proceedings of the 2025 4th International Conference on Cryptography, Network Security and Communication Technology*. <https://doi.org/10.1145/3723890.3723911>
- Wang, D., Zhang, H., & Yu, Z. (2026). MST-MFGAT: An adaptive temporal convolution with feature graph attention network for time series anomaly detection. *Neurocomputing*, 664, 132134. <https://doi.org/10.1016/j.neucom.2025.132134>
- Harje, D. T., & Reardon, F. H. (1972). Liquid Propellant Rocket Combustion Instability. NASA SP-194. <https://ntrs.nasa.gov/citations/19720026079>
- Culick, F. E. C. (2006). Unsteady Combustion in Liquid Rocket Engines: Dynamics, Instabilities, and Control. NATO RTO-EN-AVT-143.
- Raissi, M., Perdikaris, P., & Karniadakis, G. E. (2019). Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations. *Journal of Computational Physics*, 378, 686-707. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2018.10.045>
- Mariappan, S., Nath, K., & Karniadakis, G. E. (2024). Learning thermoacoustic interactions in combustors using a physics-informed neural network. *Engineering Applications of Artificial Intelligence*, 138, 109388. <https://doi.org/10.1016/j.engappai.2024.109388>
- Li, A., Du, J., & Liu, Y. (2026). Domain-decomposition physics-informed neural network approach for the acoustic boundary impedance estimation of a combustion chamber model. *Journal of Vibration and Control*. <https://doi.org/10.1177/10775463261433496>
- Wu, J., Wang, X., Zhang, G., Liu, J., Li, X., Zhang, Y., Zhang, H., Lyu, J., Wang, B., & Wu, Y. (2025). Physics-informed machine learning for combustion: A review. *arXiv*. <https://arxiv.org/abs/2509.03347>
- Mousavi, M., Caldwell, C., Baltes, J., Aljaseem, M., & Lee, B. J. (2025). Physics-Informed Neural Networks in Clean Combustion: A Pathway to Sustainable Aerospace Propulsion. *arXiv:2509.08094*. <https://arxiv.org/abs/2509.08094>
- Selvam D., C., Devarajan, Y., Raja, T., Tiwari, A., Sunil Kumar, M., Sharma, K., Agrawal, A. P., Khandual, A., & Mehar, K. (2026). Physics-Informed machine learning for turbulent combustion in aerospace propulsion: bridging physical rigour and data intelligence. *Engineering Applications of Computational Fluid Mechanics*, 20, 2678066. <https://doi.org/10.1080/19942060.2026.2678066>
- Ochella, S., Dinmohammadi, F., & Shafiee, M. (2024). Bayesian neural networks for uncertainty quantification in remaining useful life prediction of systems with sensor monitoring. *Journal of Mechanical Engineering Science*. <https://doi.org/10.1177/16878132241239802>
- Chen, C., Wang, C., Guo, J., Cui, P., Zheng, J., & Liu, Z. (2025). Remaining useful life prediction considering multiple uncertainty information via Bayesian BiGRU-based method. *Reliability Engineering & System Safety*, 264, 111431. <https://doi.org/10.1016/j.ress.2025.111431>
- Dresia, K. (2025). Rocket Engine Control with Deep Reinforcement Learning. DLR-Forschungsbericht DLR-FB-2025-16. <https://doi.org/10.57676/bwbm-p528>
- Dresia, K., Adler, A., Saraf, A., Hahn, R., Kurudzija, E., Traudt, T., Deeken, J., & Waxenegger-Wilfing, G. (2023). Rocket Engine Control with Neural Networks: Experimental Results of the LUMEN Turbopump Test Campaign. *AIAA SciTech 2023 Forum*, AIAA 2023-0137. <https://doi.org/10.2514/6.2023-0137>

- Börner, M., Traudt, T., Dresia, K., Armbruster, W., Suslov, D., Groll, C., Hahn, R. D., Saraf, A. M., Deeken, J., Hardi, J., Oschwald, M., & Schlechtriem, S. (2024). Component Test Results and Project Progress of the DLR Liquid Upper Stage Demonstrator Engine (LUMEN). AIAA SciTech 2024 Forum, AIAA 2024-1398. <https://doi.org/10.2514/6.2024-1398>
- DLR. (2026). LUMEN: AI-assisted reusable rocket engines. German Aerospace Center. <https://www.dlr.de/en/research-and-transfer/featured-topics/reusable-space-transportation/lumen>
- DLR. (2026). LUMEN, Liquid Upper Stage Demonstrator Engine. German Aerospace Center. <https://www.dlr.de/en/research-and-transfer/research-infrastructure/large-scale-research-facilities/lumen-en>
- DLR Institute of Space Propulsion. (2026). Test cell P8.3. German Aerospace Center. <https://www.dlr.de/en/ra/research-transfer/research-and-test-infrastructure/test-benches-for-space-propulsion/research-and-technology-test-bench-p8-1/test-cell-p8.3>

このAI書籍を応援する

この本が役に立った場合は、今後の翻訳、公開版、
AI知識プロジェクトをPayPalで応援できます。



PayPal

<https://paypal.me/kimkjkj>

QRコードを読み取るか、上のリンクを開いてください。