

学位論文審査報告

有村, 博紀

篠原, 歩

宮川, 英明

沖田, 茂

他

<https://doi.org/10.15017/17351>

出版情報 : 九州大学大学院総合理工学報告. 16 (3), pp.359-368, 1994-12-01. 九州大学大学院総合理工学研究科

バージョン :

権利関係 :



学位論文審査報告

氏名(本籍) 有村博紀(福岡県)
 学位記番号 総理工博乙第200号
 学位授与の日附 平成6年6月27日
 学位論文題目 Inductive Inference from Positive
 Data Based on Generalization
 (一般化にもとづく正例からの帰納推論)

論文調査委員

(主査) 九州大学 教授 有川 節 夫
 (副査) " " 宮野 悟
 " " 河原 康 雄
 " " 高田 建次郎

論文内容の要旨

帰納推論は、例からの学習の理論的モデルであり、与えられた具体例から一般的な概念を推論する過程として定式化される。目標概念に属する例(正例という)だけから、その概念を推論するような帰納推論、正例からの帰納推論という。本論文の目標は、应用到した帰納推論を実現するための統一的な手法を確立することである。実際の応用においては、負例の獲得は難しい場合が多く、さらに、推論は限られた計算機資源のもとで実行される。そこで、正例から効率よく推論する推論機械について考察する。

一般化は、帰納推論の重要な側面の一つである。推論機械は、与えられた例の集合を一つ概念に一般化して、目標概念を推測する。正例からの帰納推論においては、過剰な汎化を避けるため、与えられた例の一般化が段階的に行われる必要がある。そのため、極小な汎化を効率よく求めることが帰納推論の鍵となる。

本論文では、推論対象の概念が汎化関係(汎化系という)に基づいて定義されている場合について考察する。例えば、 $[\]$ を空リスト、 $[a, b, c]$ を要素、 a, b, c からなるリストとしたとき、表現 $app([\]x, x)$ は、代入例として得られる事実の集合 $\{app([\], [\]), app([\], [a], [a]), \dots\}$ を表していると考えることができる。このとき、表現 $app(y, z, w)$ が表わす事実の集合は、先の集合を含むので、集合の包含の意味で $app([\], x, x)$ より一般的な概念を表す。また、表現 $app(y, z, w)$ の変数 y, z, w のそれぞれに $[\], x, x$ を代入すると、表現 $app([\], x, x)$ が得られるので、 $app(y, z, w)$ は代入の意味で $app([\], x, x)$ より一般的であると考えられる。汎化系では、概念の集合としての包含関係を意味的關係、概念を表す表現の代入による関係を構文的関係とよぶ。一般に、これらの関係は一致しない。

定数記号と変数からなる文字列であるパターンおよび一階論理の項である木パターンが、本論文で扱う汎化系である。推論の対象としては、汎化系によって定義される概念およびそれらの和として定義される和概念を考え、与えられた例の集合を説明する極小な概念および和概念を見つける問題を考察する。先の例でいえば、事実の集合 $\{app([\], [\]), app([\], [b], [b]), app([a, b], [b], [a, b, b]), app([b, a], [\], [b, a])\}$ が例として与えられたとき単一概念による汎化として $app(x, y, z)$ では一般的すぎるが、2つの概念の和概念による汎化としては、 $\{app([\], x, x), app([x | y], z, [x | w])\}$ が極小な汎化として考えられる。ここで、 $[x | y]$ は先頭が x で残りが y であるリストを表す。このように、単一概念による汎化に比べて、和概念による汎化はより精密な汎化を与える。極小な単一概念を求めめる問題は、これまでにもよく研究されておりそのほとんどが構文的関係に基づいて計算される。本論文の最重要課題は、和概念のための効率のよい極小汎化アルゴリズムを開発し、それを正例からの帰納推論に应用することである。

本論文の主要な結果についてまとめる。

はじめに、汎化系を和概念に対応する多重汎化系に拡張し、構文的に極小な多重汎化を求めめる多項式時間アルゴリズムを実現する。このためには、構文的汎化関係を段階的に定める「精密化演算子」が存在すれば十分であることを証明する。さらに、パターン言語および木パターン言語に対する精密化演算子を与える。これらについては、第4章から第6章で論じる。

2番目に、極小な多重汎化に基づく、正例からの多項式時間帰納推論について論じる。まず、構文的関係が意味的關係と一致するための十分条件を包含に関するコンパクト性として与え、定数記号が十分に多く使えるすると、パターン言語および木パターン言語はいずれもこの十分条件を持つことを証明する。これらの結果をパターンの2つの部分族、 m -変数正則パターンおよび1変数パターン、および木パターンに適用し、

それぞれ高々 k 個の和概念からなるクラスに対して、効率よく正例からの帰納推論が可能であることを示す。これらの結果は、第7章で述べる。

3番目に、木パターンの極小多重汎化アルゴリズムを用いて、ちょうど2つの節からなる Prolog プログラムを、正例だけから効率よく自動合成する手法を与える。この手法では、プログラムの頭部が極小な多重汎化として得られることを活用して、負例を用いずにプログラムを合成する。この結果は、第8章で述べる。

4番目に、木パターンの概念和の族が、正負両例を用いる PAC 学習の枠組みでは効率よく学習できないことを証明する。この結果は、同じ族が正例だけから効率よく帰納推論可能であったのと対照的である。これについては、第9章で論じる。

本論文で示したこれらの結果は、構文的に極小な多重汎化が、正例からの多項式時間推論において有用な概念であることを主張するものである。

論文調査の要旨

帰納推論とは、与えられた一連の具体例からそれらを説明する一般的な概念を導き出す過程をいう。したがって、学習、特に例からの機械学習の理論的なモデルであり、情報科学のもっと基本的な課題の一つである。帰納推論は、正例という目標概念に属する例だけから推論する正例からの帰納推論と正負両方の例から推論する完全例からの帰納推論に大別される。知識獲得や機械発見等の実際的な問題への応用においては、正例からの帰納推論が自然であり、同時に帰納推論に要する時間や記憶域などの計算機資源にも制限がある。また、帰納推論においては、与えられた例の集合を汎化することが基本である。正例からの汎化に際しては、過剰な汎化を避けねばならないという基本的な問題がある。そのため、正例からの帰納推論では、それまでに与えられた正例のある意味で極小な汎化を求める方式が採用されている。

こうした正例の集合の極小な汎化を効率的に求めるアルゴリズムとしては、Plotkin による最小汎化アルゴリズムが知られている。しかし、彼のアルゴリズムはただ一つの汎化概念を求めるもので、極小ではあるがなお過剰な汎化を求めてしまう傾向がある。そこで、正例の集合を複数の概念へ汎化することによって過剰な汎化を避けることが考えられるが、この問題は、集合の部分集合への分割に伴う計算量の大きい問題と深

く関係しているために、効率的なアルゴリズムの開発は困難あるいは不可能であろうと考えられていた。

本論文では、以下に示すように、この実用上重要な問題を理論的に解決し、その結果を正例からの Prolog プログラムの多項式時間帰納推論の問題に適用し、さらに、この問題を計算学習理論のもう一つの主要なパラダイムである PAC (Probably Approximately Correct) 学習の観点からも追究したものである。

1. 汎化関係を複数の概念の汎化関係に拡張した多重汎化系を導入して、構文的に極小な多重汎化を求める多項式時間アルゴリズムを開発している。また、このためには、構文的な汎化関係を段階的に求める一種の精密化演算子が存在すれば十分であることを証明し、さらに、パターン言語および木パターン言語という形式言語および述語論理の枠組みにおける計算論的学習理論の最も基本的な対象に対して具体的な精密化演算子を与えている。

2. 極小な多重汎化による正例からの多項式時間帰納推論について研究し、構文的な汎化が意味的な汎化すなわち概念の外延の包含関係による汎化と一致するための有用な十分条件を与えている。また、定数記号を十分に使えば、パターン言語および木パターン言語はこの条件を満たすことを証明し、いくつかの重要なパターン言語族および木パターン言語族に対して、指定された個数以下の概念和からなる族が効率よく正例から帰納推論可能であることを証明している。

3. 木パターンの極小多重汎化アルゴリズムを用いて、二つの節からなる Prolog プログラム族が正例だけから効率よく自動合成できることを証明している。これは、正例から多項式時間で帰納推論可能であることを示した初めての具体的な Prolog プログラムとしても重要な結果である。

4. 木パターン言語の和で表せる概念和の族は、PAC 学習に関しては、正負両方の例を用いても効率よく学習できないことを証明している。この結果は、同じ族が、正例から効率よく帰納推論可能であるという上記2で説明した結果と好対照をなすものである。

以上要するに、本論文は極小多重汎化という概念を導入し、それを求める多項式時間アルゴリズムを開発し、それが計算論的学習理論の展開、特に正例からの効率的な帰納推論可能性および PAC 学習可能性の研究において重要であることを示したもので、情報科学上寄与するところが大きい。よって、本論文は博士

(理学)の学位論文に値するものと認める。

氏名(本籍) 篠原 歩(福岡県)
 学位記番号 総理工博乙第201号
 学位授与の日附 平成6年6月27日
 学位論文題目 Algorithmic Learning and Teaching
 (アルゴリズム論的学習と教示)

論文調査委員

(主査) 九州大学 教授 有川 節夫
 (副査) 〃 〃 宮野 悟
 〃 〃 河原 康雄
 〃 〃 岩間 一雄

論文内容の要旨

与えられた例から概念を学習することは、人間の最も知的な活動の一つである。したがって、例を与えるだけで、あらゆるものを自動的に学習してくれる計算機システムを構築することは、情報科学の重要な課題である。計算機に学習できるものは何かという疑問に答えるためには、計算機にとっての学習とは何かを明確にしておく必要がある。

例からの概念学習を理論的にとらえる枠組みとして、1984年に Valiant によって提唱された PAC 学習(Probably Approximately Correct learning)のパラダイムは、例が未知の確率分布に従ってランダムに得られる状況下で、目標概念の良い近似を高い確率で出せるかどうかを議論するものである。理論的な側面に関しては様々な非常に深い研究がなされており、特に、Vapnik-Chervonenkis 次元(VC次元)による学習可能性の特徴付けは、最も重要な定理として知られている。しかし、具体的な概念クラスに関する学習可能性についてはほとんどが否定的な結果ばかりであり、例えば、正則言語族でさえも、暗号解読の困難さに関する標準的な仮定の下で、多項式時間では学習不可能であることが証明されている。それゆえ、PAC 学習可能性を現実の問題に適用する研究はほとんどなされていない。また、学ぶことと教えることとは密接に関連しているにもかかわらず、数え方の違いによる学習効果の差、あるいは概念を数えるために要する手間などについてもほとんど言及されてこなかった。

本論文ではまず、応用にも適した概念クラスに対して、多項式時間学習可能性を証明した。事実、この結

果に基づいて構築した機械学習システムで、アミノ酸配列のデータから、重要なモチーフを発見することに成功した。また、VC次元に関するいくつかの計算量の問題を解決した。さらに、学習における教師の役割を定式化し、その存在意義と仕事の困難さを理論的な枠組みのもとで解明した。

第3章、4章では、パターン言語を核とする2種類の言語族に関して、多項式時間学習可能な部分族を提示した。パターンとは、例えば、 $1x22y, 1x2xy$ のように、定数記号と変数記号からなる文字列であり、パターン言語とは、パターンの中の各変数に任意の定数文字列を代入して得られる文字列からなる集合をいう。

第3章で考察する基本形式体系(EFS)は、論理プログラム的一种で、引数として項の代わりにパターンを用いたものである。確定節における本体と頭部のパターンの継承性に着目することによって、記述力を十分に残したまま、仮説を大幅に絞込むことを可能にした。そして、節、変数、アトム、および引数の個数をそれぞれ任意の定数 $m, k, l, r \geq 1$ に固定した継承的基本形式体系の言語族 $H\text{-EFS}(m, k, l, r)$ が多項式時間学習可能であること、さらに、長さ限定という条件を加えた族 $LB\text{-H-EFS}(m, k, r)$ が NC^2 学習可能であることを証明した。一方、変数の個数を制限しなければ、正則言語族の部分族である正則パターン言語族でさえ多項式時間学習不可能になることを計算量理論の標準的な仮定のもとで証明した。

第4章で対象とするパターン上の決定木は、分岐規則としてパターンを用いる二分決定木であり、複数のパターンの和・積・否定を許した表現とみなすこともできる。ここでは、正則パターンの変数の個数と決定木の深さを任意に定数で限定した族が多項式時間学習可能であることを証明した。この第4章、5章で得られた学習可能性は、与えられたデータに潜在する概念がその概念クラスに入っている場合には、よい近似を高い確率で出力できることを保証するものであり、第7章で構築する機械学習システムの設計の基礎となっている。

第5章では、VC次元を求める計算量の諸問題を解決した。この問題に対しては、すでに $O(n^{\log n})$ 時間アルゴリズムが知られていたが、多項式時間アルゴリズムは未だに与えられていない。本論文では、このVC次元問題と、変数の個数を制限した充足可能性問題との相互の多項式時間還元を与えた。この結果は、VC

次元問題が、 $O(n^{\Theta(n)})$ 時間計算可能なクラスの困難さを代表する問題であることを意味し、したがって、多項式時間では解けないが、また NP 困難でもないという強い状況証拠となっている。

第6章では、教師の立場からの学習をとらえ、教示可能性を定式化して PAC 学習可能性との関係を解明した。ここでは、学習や教示に要する計算時間を考慮に入れない場合は教師付きの学習は普通の学習と差がないが、多項式時間という制限をつけると教師付きでなければ学習不可能な概念クラスが存在することを証明した。また、この枠組の中で、教示しやすいが学習しにくい概念クラスなどを見つけた。さらに、学習のための小さな教材を作成することの困難さについて、その NP 完全性を証明し、またその近似アルゴリズムを与えた。

第7章では、上記の理論的結果から得られた知見をもとに、アミノ酸配列データから知識を獲得する機械学習システムを構築した。基本的な分類問題である膜貫通領域同定問題に対して、基本形式体系および正則パターン上の決定木によるモチーフ抽出を行い、極めて単純でしかもこれまで知られていなかった重要なモチーフを発見した。

論文調査の要旨

与えられた例から概念を学習することは、人間の最も知的な活動の一つである。こうした知的活動を計算機システム上に実現することは、情報科学の重要な課題として注目され、多くの研究が理論と実際の両面からなされている。この課題に応えるためには、まず計算機にとっての学習とは何かを明確にし、その学習をどのようにアルゴリズムとして実現するかという問題を解決しなければならない。

例からの概念学習を理論的にとらえる枠組みとして、1984年に Valiant によって提唱された PAC (Probably Approximately Correct) 学習のパラダイムは、未知の確率分布に従ってランダムに例が得られるという状況のもとで、目標概念の良い近似を高い確率で出せるかどうかを議論するものである。PAC 学習の理論的な側面に関しては、非常に深い研究がいくつかなされており、特に、Vapnik-Chervonenkis 次元 (VC 次元) による学習可能性の特徴付けは、最も重要な定理として知られている。しかし、具体的な概念クラスに関する学習可能性についてはほとんどが否定的な結果ばかり

であり、例えば、正則言語族でさえも、暗号解読の困難さに関する標準的な仮定のもとで、多項式時間では学習不可能であることが証明されている。それゆえ、PAC 学習可能性を現実の問題に適用する研究はほとんどなされていなかった。また、学ぶことと教えることは密接に関連しているという認識があるにもかかわらず、教え方の違いによる学習効果の差、あるいは概念を教えるために要する手間などについてもほとんど手がつけられていない状況であった。

この論文は、こうした学習と教示に関する重要な課題に対して、アルゴリズムの観点から独自の理論を展開し、解決に導いている。本論文で得られた主な成果は、以下の4点に要約できる。

1. 非常に応用性の高い概念クラスを発見し、その多項式時間学習可能性を証明している。まず、節、変数、アトム、および引数の個数をそれぞれ任意の定数 $m, k, l, t, l \geq 1$ に固定した継承的基本形式体系の言語族 $H\text{-EFS}(m, k, l, t, r)$ が多項式時間学習可能であることを示し、長さ限定という条件を加えた族 $LB\text{-H-EFS}(m, k, r)$ が NC^2 学習可能であることを証明している。次に、分岐規則としてパターンを用いる二分決定木を導入し、正則パターンの変数の個数と決定木の深さを任意に定数で限定した族が、多項式時間学習可能であることを証明している。この正則パターン上の決定木は、複数の正則パターンの和・積・否定を許した表現とみなすことができるため、記述能力において大きな可能性をもったものである。一方、変数の個数を制限しなければ、正則言語族の部分族である正則パターン言語族でさえ多項式時間学習不可能になることを計算量理論の標準的な仮定のもとで証明している。

2. VC 次元に関するいくつかの問題の計算量を解明している。本論文では、この VC 次元問題と変数の個数を制限した充足可能性問題との相互的多項式時間還元を与えている。この結果は、VC 次元問題が、 $O(n^{\Theta(n)})$ 時間計算可能なクラスの困難さを代表する問題であること、すなわち、多項式時間では解けないが、また NP 困難でもないという強い状況証拠となっている。

3. 学習における教師の役割に着目して、教示可能性の定式化に成功し、教師の存在意義と仕事の困難さを理論的な枠組みのもとで明らかにしている。学習や教示に要する計算時間を考慮に入れない場合は、教師付きの学習は普通の学習と差がないが、多項式時間という制限をつけると教師付きでなければ学習不可能な

概念クラスが存在することを証明している。また、この枠組みの中で、教示しやすいが学習しにくい概念クラスなどを見つけている。さらに、学習のためのよい教材を作成することの困難さについて、その NP 完全性を証明し、近似アルゴリズムを与えている。

4. 上記1の理論的結果から得られた知見をもとにして、タンパク質のアミノ酸配列データから知識を獲得する機械学習システムを構築し、それをを用いて、膜貫通領域同定問題に対し、基本形式体系および正則パターン上の決定木によるモチーフ抽出を行い、極めて単純でしかもこれまで知られていなかった重要なモチーフを発見している。この発見は、ゲノム情報の分野における PAC 学習に基づいた機械学習の有効性を示す初めてのものである。

以上、要するに本論文は、学習と教示に関するアルゴリズム論的理論を展開し、理論と実際の両面から、これまで未踏であった重要な問題を解決したもので、情報科学上寄与するところが大きい。よって、本論文は、博士(理学)の学位論文に値するものと認める。



氏名(本籍) 宮川 英明(熊本県)
 学位記番号 総理工博乙第202号
 学位授与の日附 平成6年7月27日
 学位論文題目 金属材料の高温変形挙動の予測に関する研究
 論文調査委員
 (主査) 九州大学 教授 吉 永 日出男
 (副査) 〃 〃 沖 憲 典
 〃 〃 森 永 健 次
 〃 〃 蔵 元 英 一

論文内容の要旨

近年、金属材料の成形と同時にその材質も制御することのできる制御圧延など、いろいろな熱間加工法が開発されているが、これらの加工を効率よく高精度で行なうために、変形応力の予測技術の確立が強く要望されている。これまでもいくつかの変形応力の予測法が提案されているが、それらはいずれも多数の実験結果を数式化したもので汎用性に欠ける。また熱間加工やクリープ変形に関連して行なわれてきたこれまでの高温変形に関する基礎研究は、主に加工硬化と回復がバランスする定常状態を対象として進められてきた

が、実際の塑性加工やクリープ変形には定常状態だけでなく定常にいたるまでの遷移過程が含まれている。本研究は、実用材料として広く用いられている固溶強化合金と固溶強化に分散強化が複合した合金について、変形応力の変形経路依存性を実験的に検討するとともに、高温変形機構の基本原理に基づいた、遷移過程を含む汎用性の高い変形挙動予測法を開発して、実測された経路依存性やクリープ挙動を再現できることを示したもので、以下の7章から構成される。

第1章では、本研究の背景と目的および本研究の概要について述べた。

第2章では、変形応力の経路依存性の検討に用いた試験片の作製方法について述べ、任意の経路に沿った引張試験ができるように改良した試験機の概要とその制御特性について述べた。さらに、提案した予測法の検証に用いた変形経路についても述べた。

第3章では、高温変形応力の経路依存性について実験的に検討し、経路依存性の一般的傾向について述べた。すなわち、合金の種類や温度によって変形応力のレベルや形状は異なるが、同じ時間で同じひずみに達したときの変形応力は経路に依存すること、その後の経路を同じにすると短い遷移過程のあと前歴に依存しない応力で変形が進むことなどの特徴は実験したいずれの合金でも見られることを示した。

第4章では、固溶強化合金について、変形応力が転位同士の相互作用によるいわゆる内部応力と、転位の溶質雰囲気引きずり運動に有効に働く有効応力の和で与えられるという知見に基づいて、変形応力の予測法を開発した。また、予測に必要なパラメータの温度依存性および合金組成依存性を明らかにした。本予測法は、転位の溶質雰囲気引きずり機構が働く範囲で、任意の変形経路に沿った変形応力を精度よく予測できること、クリープ曲線も予測できることを示した。さらに、定常状態における転位密度、ひずみ速度の応力指数、および変形応力に占める内部応力の割合の予測値はいずれも実測値とよく一致することを示した。

第5章では、本研究で開発した予測法と他の予測法との比較・検討を行い、本予測法が優れていることを明らかにした。固溶強化合金では、溶質雰囲気引きずり機構による転位のすべり運動が変形を律速している変形条件の領域(温度と変形応力またはひずみ速度の範囲)において、ひずみ速度の応力指数は約3となるが、この変形領域より高応力側と低応力側に応力指数

が3より大きくなる領域がある。この応力指数が3から変化し変形機構が変わる遷移応力を本予測法から導き、実測値とよく一致することを示した。

第6章では、固溶強化に分散強化が複合した合金について、分散粒子に起因する内部応力の増加が分散粒子の間隔のみならず転位密度と負荷応力にも依存することを理論的に示した。この理論を用いて複合強化合金の変形応力予測式を導き、実測した変形挙動を精度よく再現できることを示した。分散強化が複合した合金の定常状態におけるひずみ速度の応力指数は固溶強化のみの合金の3よりかなり大きくなる。この応力指数の変化も本予測法で定量的に予測できることを示した。複合強化合金の高温変形においては、低転位密度では分散粒子による変形応力の増加が Srolovitz の理論値に等しいが、転位密度が増加するとこの理論値より小さくなることを実験的に明らかにし、この挙動も、本予測法で定量的に再現できることを示した。

第7章では、本研究で得られた主な結果を要約した。

論文調査の要旨

近年、金属材料の成形と同時にその材質も制御できる制御圧延など、いろいろな熱間加工法が開発されているが、これらの加工を効率よく高精度で行うために、変形応力の予測技術の確立が強く要望されている。

これまでもいろいろな予測法が提案されているが、それらはいずれも多数の実験結果を数式化したもので、材料毎に数式化する必要があり、汎用性がない。また、熱間加工やクリープ変形に関するこれまでの基礎研究は主に加工硬化と回復が均衡した定常変形について行われたもので、実際の変形に含まれる遷移過程に関する知識が不十分である。

本研究は、遷移過程をも含む汎用性の高い変形挙動の予測法を変形機構の基礎知識に基づいて考案し、実用材料として広く用いられている固溶強化合金と、固溶強化と分散強化が複合した合金の高温変形に適用したもので、以下の結果を得ている。

(1) 時間-ひずみ平面上の任意の経路に沿って変形できるように試験機の制御系を改良し、これを用いていろいろな経路での応力-ひずみ曲線を求め、同じ時間で同じひずみを与えても、その点に至るまでの経路によって変形応力が著しく異なることを明らかにしている。

(2) 固溶強化合金について、変形応力が転位同士の

相互作用による内部応力と、転位がそのまわりに形成される溶質原子の雰囲気から受ける有効応力との和で与えられるという知見に基づいて、変形応力変化の予測式を導き、これを経路に沿って積分することによって、任意の経路での応力-ひずみ曲線を求める方法を示し、予測に必要なパラメータの温度依存性を明らかにしている。

(3) 固溶強化と分散強化が複合した合金について、分散粒子に起因する内部応力の増加が、分散粒子の間隔のみならず転位密度と負荷応力にも依存することを理論的に明らかにし、これに基づいて、複合強化合金の変形応力予測式を導いている。

(4) 提案した方法でいろいろな温度や経路での変形応力を予測し、転位の溶質雰囲気引きずり機構が働く変形条件であれば、実験で求めた変形応力の経路依存性をよく再現できることを示している。また、この方法で、これまでに報告されているクリープ曲線、転位密度、ひずみ速度の応力指数、内部応力と有効応力の割合、溶質雰囲気引きずり機構が働く変形条件の範囲もよく再現できることを示している。

(5) これまでに提案されている他の予測法と比較し、予測精度、簡便さ、汎用性の点でこの予測法が優れていることを示している。

以上要するに、本論文は実用材料として広く用いられている固溶強化合金と複合強化合金について、溶質雰囲気引きずり機構が働く変形条件での変形挙動を、変形機構に基づいて予測する方法を示したもので、金属材料学及び材料強度学に寄与するところが大きい。よって本論文は博士(工学)の学位論文に値するものと認める。

氏名(本籍) 沖田 茂(愛知県)

学位記番号 総理工博乙第203号

学位授与の日付 平成6年7月27日

学位論文題目 Studies on Synthesis and Characterization of Polyarylenes and Polyarylethers
(ポリアリーレン類及びポリアリールエーテル類の合成と特性に関する研究)

論文調査委員

(主査) 九州大学 教授 田代昌士

(副査)	〳	〳	金 政 修 司
	〳	〳	入 江 正 浩
	〳	〳	斎 藤 省 吾

論文内容の要旨

構造単位が主として芳香族環からなる芳香族高分子は一般に耐熱性および機械強度に優れるため、近年各種工業用途においてその需要が高まっている。中でも芳香族ポリエーテル、ポリエーテルケトン、ポリエーテルスルホン類はコストパフォーマンスに優れ、自動車部品、電気電子部品用途などで広く利用されている。これら芳香族高分子は2,6-ジ置換フェノールの酸化ラジカル重合、ビスフェノールとジハロ芳香族ケトンあるいはスルホンとの求核置換重合、Friedel-Crafts アシル化重合によって製造されているが、今後、芳香環密度のより高いポリマー構造が要求されることが予想され、それに伴って芳香族高分子の新しい製造法の開発が必要となる。本論文は芳香環どうしのカップリング反応を用いた重合反応に着目し、特に Ni(O) 触媒によるジハロ芳香族モノマーあるいは芳香族ビストリプレートモノマーのホモカップリング反応、およびビス(1-ナフチル)型あるいはビス(1-ナフトキシ)型モノマーのカチオン・ラジカルカップリング反応を用いて種々の構造を有する芳香族高分子の合成を行ったものであり、7章よりなっている。

第1章では序論としてカチオン・ラジカルを中間体とする重合反応および遷移金属触媒によるカップリング反応を用いた重合反応について概説した。

第2章では Ni(O) 触媒によるホモカップリング反応を用いて置換基を有するポリ(p-フェニレン)を合成した。側鎖としてフェニル基、メトキシカルボニル基、tert-ブチル基を有する1,4-ジハロおよび1,4-ビス(トリフルオロメチルスルホニルオキシ)ベンゼンを合成し、それぞれを in-situ で調整した Ni(O) 触媒の存在下に重合した。この際、反応条件の違いによってモノマーの重合性が逆転する傾向が見られ、トリプレート型モノマーは THF 条件下において優れた重合性を示し、特に電子吸引性のエステル基を有するモノマーから重合度47の置換ポリ(p-フェニレン)が得られた。ビストリプレートはヒドロキノンまたはビスフェノール類から1段階で調整することができるので各種置換基を有するポリ(p-フェニレン)類の合成法として優れている。

第3章ではジ置換クォーターフェニル誘導体を用いて Ni(O) 触媒によりポリフェニレンを合成した。まず最初に3種類のジクロロクォーターフェニルの重合を検討し、o-構造あるいは m-構造のようなキック構造の導入によって溶解性が改善されることを明らかにした。この溶解性の増大は、コンフォーメーション異性に基づくエントロピーの増大に対応しており、エントロピー増大によって結晶化が阻害され、したがって溶解性が増大していると考えられる。そこでコンフォーメーション異性に基づくエントロピーのさらなる増大を目的としてバルキーなフェニル基および縮環構造を導入した4,4'-ビス[5-(トリフルオロメチルスルホニルオキシ)-2-ピフェニル]-1,1'-ビナフチルを合成し、Ni(O) 触媒による重合を行ったところ、重合度36に相当するポリアリーレンが得られた。この値はポリアリーレンとしてはかなり高い値である。このように1,1'-ビナフチル骨格を有するモノマーから高い重合度のポリアリーレンが得られたことから第4章ではビス(1-ナフチル)ピフェニル型モノマーを合成し、それらのカチオン・ラジカル重合について検討した。ニトロベンゼン中、FeCl₃ を酸化剤として用いて重合を行った結果、3,3'-ビス(1-ナフチル)ピフェニルの重合において重合度40に相当するポリアリーレンが得られた。これは前章で得られた結果に匹敵する高い値であった。さらに興味深いことにこのカチオン・ラジカル重合反応で得られたポリアリーレンはすべて赤色系に呈色しており、これは重合反応中に分子内環化反応によって形成された大環状縮環構造の存在によるものであることが明らかとなった。また、この分子内環化反応によって生成した縮環構造が分子鎖の生長反応を阻害していることを明らかにした。

第5章ではケトンあるいはメチレン基を有するビス(1-ナフトキシ)型モノマーを合成してそれらのカチオン・ラジカル重合について検討した。これらのモノマーはエーテル酸素の電子供与性によりナフタレン環が活性化されており、従って第4章において検討したビス(1-ナフチル)型モノマーより全般的に高い重合性を示した。分子内に2つのカルボニル基を有するモノマーの場合にはカルボニル基の電子吸引性によってナフタレン環が不活性化されるために高重合度体は得られなかったものの、カルボニル基をメチレン基に還元した場合には高い重合性を示し、数平均分子量が1万を越える高分子量の芳香族ポリエーテルが得ら

れた。このことから本重合反応におけるモノマーの重合性はカチオン・ラジカルの反応性よりもモノマーの求核性、言い換えればモノマーの酸化されやすさ、によって支配されていることが明らかとなった。

第6章では完全に芳香族構造のみからなるビス(1-ナフトキシ)ピフェニルあるいはビス(1-ナフトキシ)ベンゼン型モノマーのカチオン・ラジカル重合について検討し、高分子量の完全芳香族ポリエーテルの合成に成功した。いずれのモノマーも高い重合性を示し、特に2,2'-ビス(1-ナフトキシ)ピフェニルからは数平均分子量で8万を越えるポリエーテルが得られた。これまでに完全芳香族ポリエーテルはウルマン反応を応用した重合例などが知られている程度であり、合成的見地からきわめて価値ある結果である。また、本章ではカップリング反応機構について考察し、RSC機構が支配的であること、また、モノマー濃度によって律速段階が変わることから、重合反応の進行に伴って律速段階が変化していることを推察した。

第7章では本研究で得られた結論をまとめた。

論文調査の要旨

高分子材料の応用分野は、生活用品のみならずさまざまな工業材料へと拡がりを見せている。それに伴い、より優れた性能・機能をもつ高分子材料の開発が課題になっている。特に、耐熱性及び機械強度に優れた高分子材料の開発は最重要課題である。

以上の観点から、著者は200℃以上のガラス転移点をもち、フィルム形成が容易な新しい耐熱性高分子の開発を目的として、主鎖に芳香環を含む多岐にわたる高分子を合成し、以下に述べる興味ある知見を得ている。

1. フェニル、メトキシカルボニル及びtert-ブチル基本をもつ、1,4-ジハロベンゼン及び1,4-ビス(トリフルオロメチルスルホニルオキシ)ベンゼン類を合成し、それらのNi(O)触媒存在下の重合反応を検討した。即ち、トリフレート型モノマーはTHF中でより優れた重合性を示すことを見出し、メトキシカルボニル基の場合に重合度50程度の高分子を得ることに成功した。また、重合度が用いた溶媒の高分子溶解力に支配されることを明らかにした。

2. o-, m-およびp-ジクロロクオターフェニルを合成し、それらをNi(O)触媒を用いるホモカップリング反応により折れ曲がり構造をもつ高分子を得た。

p-体から生成した直鎖高分子は難溶性であるが、o-及びm-体から生成した折れ曲がり構造をもつ高分子は、配座エントロピーの増大により溶解性が增大することを見出した。

3. 重合度を高めるためにイオン化ポテンシャルの小さいナフタレン骨格をもつ4,4'-ビス[5-(トリフルオロメチルスルホニルオキシ)-ピフェニル]-1,1'ピナフチルを合成し、先に述べたホモカップリング反応を行い、重合度40程度のポリアリーレンが得られることを明らかにした。

4. 6種類のビス(1-ナフチル)ピフェニル類及び関連化合物を合成し、ニトロベンゼン溶解中FeCl₃触媒下のScholl反応を行い、数平均分子量1万を越えるポリアリーレンが生成することを見出した。

5. ビス(1-ナフトキシ)ピフェニル及びビス(1-ナフトキシ)ベンゼンのScholl反応を行い、数平均分子量9万を越える芳香族ポリエーテルが生成することを明らかにするとともに、その反応機構を詳細に検討した。

以上要するに本論文は、種々の芳香族モノマーを合成し、ホモカップリング反応及びScholl反応を用いてそれらの重合を行い、工業技術上有用な種々の高分子化合物の合成に顕著な成果を挙げたもので、高分子化学、有機工業化学、有機合成化学、有機反応化学上価値ある業績である。よって、本論文は、博士(工学)の学位論文に値するものと認める。

氏名(本籍) 松野浩嗣(山口県)

学位記番号 総理工博乙第204号

学位授与の日附 平成6年7月27日

学位論文題目 Multihead Automata and Alternation (マルチヘッドオートマトンと交代性)

論文調査委員

(主査) 九州大学 教授 宮野 悟

(副査) " " 安浦 寛人

" " 河原 康雄

" " 岩間 一雄

論文内容の要旨

理論計算機科学の分野において、並列計算に関する研究が活発になされている。交代性オートマトンは、このような状況の中で現在重要な位置にある計算モデ

ルである。交代性は強力な逐次計算の概念である非決定性に並列化を施すことでこれを一般化したものと捉えることができるが、この並列化がオートマトンの能力に与える影響に関する考察は十分になされていない。

1960年代の始めから、マルチヘッドオートマトン(MHA)はオートマトン理論における重要な計算モデルの一つとして研究が続けられている。決定性及び非決定性の場合については、その階層性や閉包性など多く性質が明らかにされているが、交代性の場合についての考察は十分に行われていない。

本論文は、MHAに交代性を導入した計算モデルの並列性の構造を明らかにするため、主に以下の3つの観点から研究を行ったものである。

交代性による並列化の本質を解明するためには、全称状態のみをもつ交代性(全称性)オートマトンについての理解を深めることが必要不可欠である。決定性—非決定性—交代性の間の差異を明らかにしようとすることは従来からの重要な問題の一つであるが、全称性の導入によって、決定性—全称性—交代性という新しい系統を設けることができる。本論文では、1方向マルチヘッドチューリング機械についてこの間に真の包含関係が成り立つこと、さらに全称性は非決定性と比較不能になることを証明した。

交代性の計算過程は木として表現されるが、この木の葉数は入力を受理するときに並列に動作したプロセス数を表わす。本論文では、交代性と非決定性の間の構造を解明するという立場から並列化の尺度としてこの葉数に着目し、交代性マルチヘッド有限オートマトン(AMHFA)について非決定性と交代性の間に無限でかつ緊密な葉数の階層が存在することを証明した。さらに定数個の葉数をもつAMHFAの受理する集合のクラスは重要な計算量のクラスであるNLOGと一致することを明らかにした。

交代性がMHAに及ぼす影響を調べるため、交代性シンプルマルチヘッド有限オートマトン(ASPMHFA)を導入した。ASPMHFAはその入力ヘッドのうち1本だけが入力記号を判別でき、他のヘッドは境界記号しか判別できないようなAMHFAである。このような強い制約にも係わらず、ASPMHFAはAMHFAと等価な能力を持つことを証明した。この結果により、交代性による並列化がMHAの最も特徴的な性質である複数記号の同時認識という機能を補う能力を持つことが明らかになった。

本論文は11章からなっている。その主要な部分は交代性マルチヘッドオートマトンの受理能力について考察したものであり、第2章から第7章までを占める。

第1章では、本論文で対象としているオートマトンモデルを研究することの意義について述べた。

第2章では、本論文で得られた結果の明確な位置づけを行いながら、これまでになされてきたマルチヘッドオートマトンの研究についてまとめた。

第3章では、第4～7章で扱っている交代性MHAの基本的概念及び用語の導入を行った。

第4章では、全称性1方向マルチヘッドチューリング機械について考察し、この受理能力はその交代性版と決定性版の真の中間に位置し、さらに非決定性版のものとは比較不能になることを証明した。また、ヘッドを1本増やすと真に受理能力が強まることなど、幾つかの階層的な性質を明らかにした。

第5章では、交代性シンプルマルチヘッド有限オートマトン(交代性SPMHFA)がAMHFAと等価な受理能力をもつことを証明した。さらに、交代性、全称性、非決定性、決定性の各SPMHFAの間の受理能力の関係を明らかにした。この他、ヘッドの個数に対して無限の階層が存在することや2方向は1方向よりも真に受理能力が強いことなどを証明した。またブル演算に対する閉包性の幾つかを明らかにした。

第6章では、葉数を限定したAMHFAについて考察し、葉数、ヘッドの個数に関する階層や、1方向と2方向に差異があることなどを明らかにした。さらに、葉数はヘッドを増やすことで補えることなど、これらの間のトレードオフに関する結果も得た。

第7章では、AMHFAをさらに一般化したと位置づけられる同期型AMHFAについて考察し、葉数を限定した場合、第6章で考察したAMHFAの階層と同様な階層が同期型AMHFAについて成り立つことを明らかにした。

第8章では、 $\log n$ 以下の領域に同期型交代性チューリング機械について1方向と2方向、同期型交代性と交代性などの間に真の受理能力の差異が存在することを明らかにした。

第9章では、リアルタイムで動作するカウンタ機械の2種類の階層を調べ、葉数を限定した同期型交代性マルチカウンタ機械のカウンタ数について階層が存在すること、及び非決定性1カウンタ機械のカウンタヘッドの反転回数を約2倍にすると真に受理能力が強ま

ることを証明した。

第10章では、マルチプロセッサ有限オートマトン(MPFA)について考察した。MPFAは定数個の有限オートマトンとそれらの動作を制御する関数から構成される。マルチヘッド有限オートマトン(MHFA)のヘッド間の情報交換機能と比べかなりの制約があるにも係わらず、MPFAはMHFAと等価な受理能力をもつことを証明した。その他、プロセッサ数、1方向と2方向などの階層性やプール演算を始めとする各種演算に対する閉包性も明らかにした。

第11章で本論文で得られた研究成果についてのまとめを行い、今後の展望について言及した。

論文調査の要旨

マルチヘッドオートマトンは、入力を読むためのヘッドを複数個備えたオートマトンであり、計算量理論やオートマトン理論において様々な角度から研究されてきた計算モデルである。一般にチューリング機械などの計算モデルは、その動作が一意に決まるかどうかによって決定性と非決定性に分類されている。交代性の概念は、1981年にChandra等によって、全称状態と存在状態という二種類の状態をチューリング機械に導入することによって与えられたものである。全称状態では計算のプロセスが並列に分岐することから、交代性チューリング機械は、並列化されたチューリング機械と考えられている。また非決定性チューリング機械は、存在状態のみからなるチューリング機械とみなせるので、交代性は非決定性の概念の拡張になっている。決定性および非決定性のマルチヘッドオートマトンについては、これまでの研究により、その計算能力や性質といった主要な課題はほぼ解決されているが、並列性を導入した交代性のマルチヘッドオートマトンについては、まだ十分に解明されていないままであった。

本論文は、主にマルチヘッドオートマトンに対して、交代性という並列化の機能を究明したもので、その計算能力と並列化の構造を明らかにする以下のような重要な結果を得ている。

(1) 交代性による並列化を解明するために、全称状

態のみからなる交代性1方向マルチヘッドチューリング機械に着目し、交代性、全称交代性、決定性のそれぞれのモデル間の計算能力の違いを明らかにし、ヘッドの個数による階層定理を証明している。

(2) 交代性の計算過程は木構造として表現され、その木の葉の個数(これをリーフサイズとよぶ)は、並列に動作する計算のプロセスの個数を表している。本論文では、交代性マルチヘッド有限オートマトンについて、このリーフサイズに着目し、リーフサイズによる階層の細分化が可能であることを証明し、交代性と非決定性の間の計算能力の格差を解明している。またリーフサイズが定数個のマルチヘッド有限オートマトンの集合認識能力は、計算量理論で重要なクラスである対数領域計算可能な集合のクラスNLOGに対応することを証明している。

(3) 交代性シンプルマルチヘッド有限オートマトンを導入し交代性という並列化がどのように計算能力に影響を与えるかを明らかにしている。このオートマトンの入力ヘッドは、そのうち1つだけが入力記号を判読でき、他の入力ヘッドは入力の特徴にある境界記号しか判読できないものである。このような強い制約にもかかわらず、交代性シンプルマルチヘッド有限オートマトンは、すべての入力ヘッドが入力記号を判読できる交代性マルチヘッド有限オートマトンと同じ計算能力をもっていることを証明している。すなわち、交代性という並列化は、この計算モデルにおいて、複数記号の同時認識という機能を補う能力をもつことを明らかにしている。

(4) Hromkovicらによって導入された同期型交代性を有限オートマトンに適用して、プロセス数に関して真の階層構造があることを解明している。また定数リーフサイズの同期型交代性有限オートマトンに対して、入力ヘッドの個数とプロセス数との間にトレードオフが存在することを証明している。

以上要するに、本論文は交代性を導入したオートマトンに対して、その計算能力と並列化の構造を様々な観点から究明したものであり、情報科学上寄与するところが大きい。よって、本論文は博士(理学)の学位論文に値するものと認める。