

知識構造化のためのナノテク材料の特性と機能に関する

オントロジー的考察

Ontological Consideration about Functions and Properties of
Nanomaterials for Knowledge Organization

垂見 晋也*¹ 古崎 晃司*¹ 來村 徳信*¹ 渡邊 英一*² 溝口 理一郎*¹
Shinya Tarumi Kouji Kozaki Yoshinobu Kitamura Eiichi Watanabe Riichiro Mizoguchi

*¹ 大阪大学産業科学研究所
I.S.I.R. Osaka Univ.

*² 社団法人 化学工学会
The Society of Chemical Engineers, Japan

In the recent material research, much work aims at realization of "functional material" by changing structure and/or manufacturing process with nanotechnology. However, relationship among function, attribute, structure and manufacturing process is usually implicit. One of its reasons is ontological ambiguity of the concept of function, attribute, and property. In this article, we firstly analyze these ambiguous concepts from the ontological viewpoint. Then, a modeling framework of functional structure and manufacturing process including the relationship is discussed.

1. はじめに

現在、材料系分野ではナノテクノロジー技術によって「特定の機能を向上させた材料や、複数の機能を持った材料を製造する」ことを目的とした研究が盛んに行われている。その際に必要とされるのは、「望む材料の機能がどのように実現されているか」、「それにはどのような構造を用いればよいか」、また、「そのような構造をもった材料を製造するには、どのような製造プロセスを用いればよいか」といった材料の「機能」-「構造」-「プロセス」の依存関係を明らかにすることである[NMC, 古崎 04]。しかしながら、このような依存関係に関する知識は分野固有で暗黙的なものになっているものが多く、異なる分野間での共有・再利用がなされていない。

その背景には、分野ごとに「機能」という言葉が様々な意味で用いられ、複数の概念が混在し、十分に識別が行われていないという問題があると考えられる。材料の機能と呼ばれるものとして、例えば、「圧縮強度」、「熱膨張率」、「導電性」、「高導電特性」を文献から拾い出すことができる。しかしながら、いわゆる属性や特性と言われるものとの区別が明確ではない。また、「圧縮強度」、「熱膨張率」は数値を値として取るが、「導電性」は「高い、低い」というような比較値を値としてとり、また「高導電特性」は「ある」「ない」や「持つ」「持たない」といった値を取る。このような値の性質の違いは概念の違いを示唆していると考えられる。さらに、工業製品設計の分野では機能を他のものへの望まれた作用として捉えることが多く、材料設計・製造分野とのとらえ方は異なっているように思われる。

筆者らはこれまでに主にプラント、工業製品、生産機械に関する機能的知識を体系的に記述するための枠組みを開発してきており[來村 02, 03]、材料の製造プロセス知識が体系的に記述できることを確認した[垂見 03]。本稿では、「機能」という概念と関連する「属性」「特性」といった概念をオントロジー工学的観点から考察し明確に定義、分類し、関連づけ、「機能」-「構造」-「プロセス」の関係性を明示化することで、設計者が容易

連絡先: 垂見晋也

大阪大学産業科学研究所 知識システム研究分野
〒567-0047 大阪府茨木市美徳ヶ丘 8-1
Tel: 06-6784-8416 Fax: 06-6879-2123
e-mail: tarumi@ei.sanken.osaka-u.ac.jp

に理解・共有できるようにすることを目指す。

2. ナノテク材料の性質、属性、特性

ここでは「性質」という概念を出発点に、材料などの物理的存在物の「属性」「特性」「機能」について検討する。物理的存在物は、ある特定の物理的観点における特徴量を持つ。このような観点を「性質」と呼び、その観点における値を「性質値」と呼ぶ。つまり、モノは性質と性質値の組を複数持つ。以下では「性質」を「属性」と「特性」の2つに大別し、さらなる分類を行う。

2.1 属性

属性はその値が定量値で表される性質を指す。材料の基本的な物性を「基本属性」と呼び、基本属性から決まる材料の性質を「反応関係属性」と呼ぶ。

(1) 基本属性

基本属性はその材料単独で定義できる属性を指す。例えば、「材料の密度」や「原子量」や「バンドギャップ」、「質量」や「長さ」などがあてはまる。

基本物性も材料の性質であるが、基本物性を指して材料の機能とは表されることはないので、本研究では材料の基本属性についての議論は行わない。

(2) 反応関係属性

物質に何らかの入力をして、それに対する反応との関係を表した属性を「反応関係属性」と呼ぶ。また、反応関係属性をその反応の種類から「出力型」と「変化型」の2種類に分けた。

● 出力型反応関係属性

例えば、電気伝導度という属性は、物質に加えた電圧の大きさと、そこに流れる電流の大きさととの比で定義される。ここで、加えた電圧を物質への入力、流れた電流を物質からの出力とすると、電気伝導度は物質の入力と出力との関係を表した属性であると考えられる。このように、入力に対して、何らかの出力が生じる際の、物質の入力と出力の関係を表す属性を「出力型反応関係属性」と呼ぶ。この属性には他に「キャリア移動度」、「発光特性」などがあてはまる。

● 変化型反応関係属性

物質に何らかの入力に加えた際、何らかの出力が生じる代わりに、体積変化や温度上昇など物質自体が何らかの変化

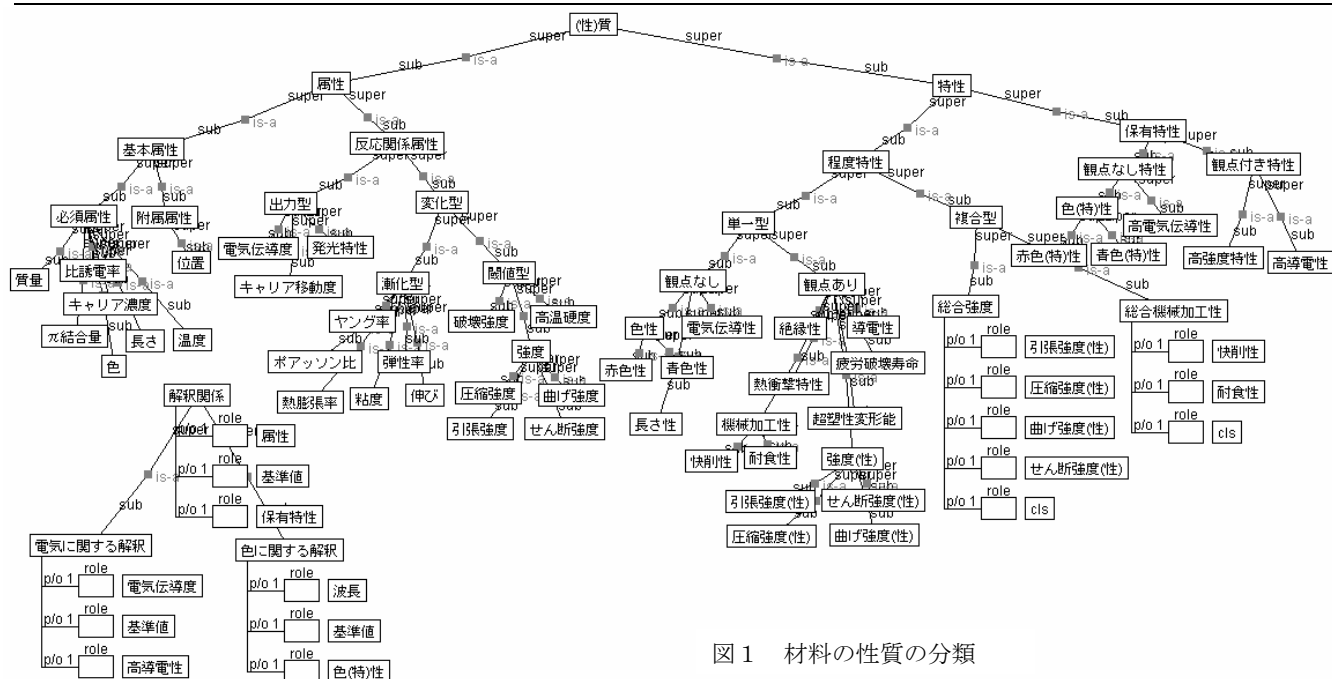


図1 材料の性質の分類

を起こす場合がある。このとき、入力とその変化の関係を表す属性を「変化型反応関係属性」と呼ぶ。

熱膨張率は、物質に加える熱量と熱により物質が膨張した比率で定義される。この際、物質に対する入力を「熱量」、物質の変化を「物質の膨張」とすると、熱膨張率は変化型反応関係属性であると言える。また、入力した熱量に対して物質の膨張は徐々に大きくなる。このような入力に対して物質の変化が徐々に起こるような入力と変化の関係を表すものを「漸化型」の反応関係属性と呼ぶ。この属性には他に「ヤング率」や「弾性率」があげてはまる。

これに対して、圧縮強度は物質に圧力を加えていき、物質がつぶれたときの圧力の大きさで定義される。このとき、加えた圧力を物質への入力、「物質がつぶれる」を物質の変化とすると、圧縮強度は変化型反応関係属性と言える。しかし、圧縮強度では、入力がある値になるまでは物質に変化が起こらず、その値を超えたときに変化が起こる。このような入力と変化の関係を表した属性を「閾値型」の反応関係属性と呼ぶ。この属性には他に「破壊靱性」や「高温硬度」などがあげてはまる。

2.2 特性

(1) 保有特性

ここでは、「高電気伝導性」「高導電性」「赤色性」を順に例として、保有特性について検討する。まず、「高電気伝導性」は物質の電流の流れやすさに関する性質を表したもので、ある材料は「高電気伝導性を持つ・持たない」のように表現される。このような「持つ・持たない」ということに関する性質値をとるような性質を「特性(property)」と呼ぶ。高電気伝導性は前述した「属性」である「電気伝導度」と結びついており、電気伝導度という属性とその値に対して以下の2つの概念操作を加えた結果であると定義できる。まず、電気伝導度の属性値のある特定の値を閾値として認定し、電気伝導度の属性値を「高い」「低い」という2値に定性化する(値定性化と呼ぶ)。この1つ目の操作は性質値に対する操作であって性質概念に対する操作ではない。次に、「電気伝導度という属性の値が「高い」という属性値であるかどうか」ということを表す概念を概念化する。この概念が例えば「高電気伝導性」とラベル付けされる。この2つ目の概念操作は性質

値に関する定性化を性質概念に取り込んで、特性概念を得る操作である(値・特性変換と呼ぶ)。「ある性質がある値であること」という意味を特性概念が含むことによって、その値は「持つ」「持たない」という意味をもつ Yes, No の2値になる。つまり、値・特性変換が「特性」を得るときの主要な操作であるが、持つ・持たないと言うためには何らかの基準値を参照し、定性化する値定性化の操作が必要である。

次に、「高導電性」という特性概念は同様に「電気伝導度」に結びつけられているが、「高絶縁性」と対をなす概念である。つまり、電気伝導度を評価する際に数値の大きさのどちらかを「よい」または「好ましい」と見なすかという評価の方向が異なる。ここではこれを「評価観点」と呼ぶ。つまり、上述の値定性化操作において評価観点を参照した結果として値の定性値が異なり、またそれを反映して特性概念も異なっている。上述した「高電気伝導性」は単に数値の大小をそのまま値の定性化(値・特性変換)に用いており、特定の評価観点に依存していない。

最後の例である「赤色性」は、「ものの色属性の値が「赤色」であるかどうか」を表す特性概念であり、「色が赤いという特性(性質)を持つ・持たない」ことを言うために用いられる。この赤色性も上で述べた概念操作で定義できる。対応する属性概念は「色」であり、属性値は実数で表現される波長である。まず、波長を複数の閾値で区分し、色の属性値を赤色、青色、緑色などの複数の値に定性化する(値定性化)。上述の高電気伝導性との違いは定性化の結果が2つではなく、複数の定性値があることである。次に、値・特性変換を行い、「色属性の値が「赤色」であるかどうか」を表す特性概念を得る。同様に他の値についても値・特性変換を行って、それぞれ「青色性」などの特性概念を得ることができる。赤色性、青色性を一般化すると色性という特性概念を得ることができる。これは、「ものが特定の色を持つ」ということを表す特性である。このように特性の一般-特殊階層を構成することができる。

以上の考察をまとめると、一般に「特性」とは「ある属性が特定の属性値であるかどうか」を表す性質であり、性質と性質値の組に関する性質である(メタ性質)。対応する属性と属性値に対して以下の一般的な概念操作を施したものとして、定義できる。

(1) 対応する属性の値を1つまたは複数の基準値に応じて、定性化を行い、2つ以上の定性値を得る(値定性化)、(2) 定性値

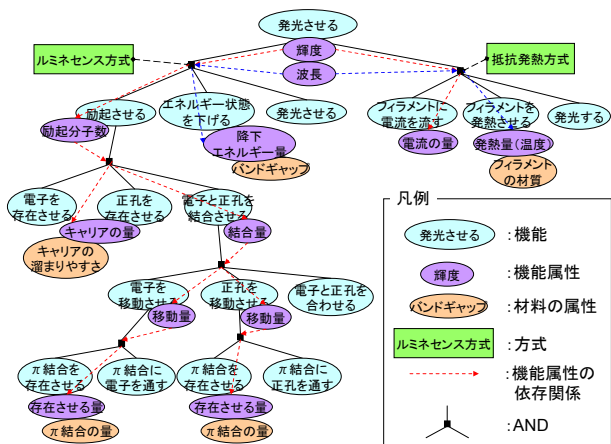


図2 「発光させる」の機能分解木

が2つであり、さらに必要があれば、値を特定の方向から評価を行う、(3)性質値に関する分類を性質概念に取り込み、「ある属性の値としてある特定の定性値を持つかどうか」という特性概念を得る。このように、特性概念は属性概念と密接に関係しているが、定性化された属性値との関係性を概念内容に取り込んでいる。その結果として、「特性を持つ・持たない」という表現が可能になる¹⁾。

(2) 程度特性

程度特性は、前項の保有特性の概念に基づいて、その値を Yes, No の2値からその程度を表す値をとるように性質概念を変えたものである。例えば、上述の「赤色性」の場合には、保有特性では「赤色性がある、ない」の2値であるが、程度特性は、赤色を表す属性値の区間の中での典型性などを基づいて、例えば「赤色性が高い・中程度・低い」と言う。高導電性の場合には通常「高導電性を持つ、持たない」よりも「導電性が高い、中程度、低い」と言われる。すなわち、程度特性は前述の3つの概念操作に加えて、「その特性を持つ」ことの程度性を表す性質値をとるように、性質概念を概念化したものである。

また、特性は参照している属性の数に基づいて「単一型」と「複合型」の2種類に分けることができる。単一型特性とはここまで議論してきた一つ一つの属性・属性値に対応している。複合型の特性とは複数の単一型の特性を複数集めて、総合的にその特性が高いか低いかを表現している特性である。例えば、一概に「強度が高い」と言っても、強度には前述の圧縮強度や、引張強度、曲げ強度、せん断強度など、複数の強度が存在する。このような複数の特性を併せてできあがる特性がここに当てはまる。「機械加工性」も複合型に当てはまり、機械加工性は「快削性」や「耐食性」などの複数の性質を参照している。

2.3 機能と属性と特性

前項までの議論より、「圧縮強度」、「熱膨張率」、「導電性」、「高導電特性」などの材料の性質を明確に分類できたと考えられる。圧縮強度や熱膨張率は変化型反応関係属性に当てはま

¹⁾属性についても「ものは色属性を持つ」といったように「持つ」という表現ができるが、これは「ものの記述の一般形(クラス定義)が色属性という要素を含む」という意味であり、ものの各インスタンスがその属性を持つ・持たないを議論しているわけではない。また、「ものAは色属性の値として赤色を持つ・持たない」と言えるが、これは属性値の保持の有無について述べており、属性そのものの保持を議論しているわけではない。したがって、「各インスタンスが性質を持つ・持たない」と言えるかどうかは属性と特性の違いである。

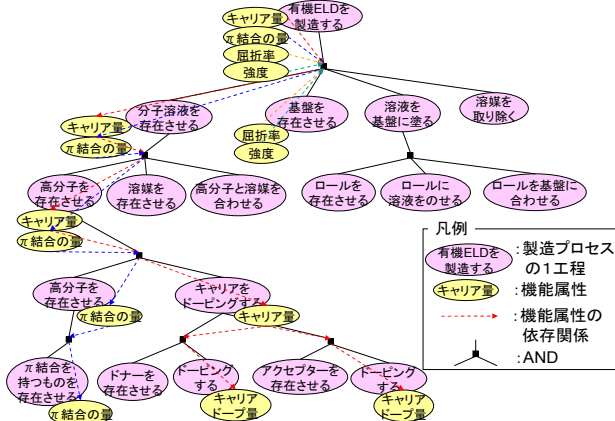


図3 有機ELディスプレイの製造プロセス木(一部)

り、導電性は程度特性、高導電特性は保有特性に当てはまると考えられる。

ここで、上述の全ての性質が機能と呼ばれる訳ではなく、材料系の研究者が指す「機能」とは特性を指すことが多い。例えば「導電性を向上させた機能調和材料」では程度特性を機能と呼び、「高導電特性を付与した機能材料」では保有特性を指していると考えられる。このとき導電性の向上や高導電特性は材料設計者に「望まれた」特性であると考えられる。1章で述べたが、工業製品設計の分野において、機能を他のものへの望まれた作用として捉えることが多い。これを考慮すると、その特性が「望まれた」ものであるという点から、程度特性や保有特性を材料の機能と捉えているのではないかと考えられる。

3. 製品の機能とその製造プロセス

3.1 機能分解木と製造プロセス木

機能分解木とは機能の達成関係を木構造で表現したもので、対象となる設計物の機能についての達成関係だけでなく、様々な情報を記述するためにその情報を枠の形や吹出しを用いて判別できるようにしている。楕円形のノードには機能が記述され、複数の部分機能の組み合わせである機能を達成する場合は、必要な部分機能への枝をくくり AND を表記する。その際、ある機能とそれを達成する部分機能系列間の枝には、部分機能系列がどのような背景知識によって達成関係を満たすかを概念化した「方式」を示す吹出しに、用いられている方式名、原理等を明記する[高橋 02]。また、部分機能はさらに機能分解することが可能で、機能分解木は複数の階層を持つ木構造となり、木構造の葉に近い部分により小さなグレインサイズの機能が現れる。

元来人工物の機能的知識を体系的に記述するために開発されたこの枠組み[来村 02,03]をナノテク分野に適用した。対象となる材料・製品の製造プロセスも、製造プロセスの1工程を機能分解木の機能と考え、1つ1つの工程のグレインサイズを小さくすることで機能分解木と同様に記述することができる[垂見 03]。このように材料の製造プロセスを機能分解木で記述すると、1つの材料の機能と製造プロセスを同じ構造で記述することができ、知識の共有・再利用が可能になると考えられる。本研究では機能分解木と区別するために機能分解木を記述する枠組みで、製造プロセスを記述したものを「製造プロセス木」と呼ぶ。

例として有機ELディスプレイの「発光させる」という機能の機能分解木と、有機ELディスプレイの製造プロセス木の一部を示す(図2, 3)。前者において、「発光させる」という機能はディスプレイが全体として発揮しており、最も下層の機能は電子輸送層や発光層などの材料が直接発揮している。このように材料、部

品, システムなどと区別せずに, 機能を発揮している主体を「装置」と呼ぶ. 後者は前者における最下層の主体である「材料」を, システムとしての統合性を持って, 製造する工程を表している.

3.2 機能属性の依存関係と特性依存木

(1) 機能属性

「発光する」は光を出すという機能を達成している. このとき, 出てきた光の「輝度」や「波長」は, その光の性質を決める属性と考えられ, 光を出すという機能達成の結果の属性と考えられる. 一方, 2つの物体を「合わせる」という機能が達成される際, 2つ物体の「接近スピード」は合わせるという機能の達成中の属性と考えることができる. このような, 機能達成の結果の属性と, 機能達成中の属性を併せて「機能属性」と呼ぶ.

製造プロセスでも機能と同様に機能属性を考えることができる. 製造プロセスにおける機能達成の結果の属性は製造した材料であるから, 製造プロセスでの機能属性はできあがる材料の性質を決めていると考えられる.

(2) 機能属性の依存関係

図2のように機能分解木中で機能属性は機能ノードの下に表示される. 全体機能の機能属性は部分機能の機能属性に依存している. 図2, 3ではそれらの依存関係を破線で表している. 例えば, 「発光する」という機能の機能属性「輝度」は部分機能である「励起させる」の機能属性「励起分子数」に依存し, 「波長」は「エネルギー状態を下げる」という機能の機能属性「降下エネルギー量」に依存しているということを表している.

ここで, 「発光する」という機能を達成するには「ルミネセンス方式」と「抵抗発熱方式」の2つの方式がある. ルミネセンス方式では光の輝度は励起分子数に依存しているが, 「抵抗発熱方式」ではフィラメントに流す「電流の量」に依存している. このように, 機能属性の依存関係は選択する方式によって異なる. また, 製造プロセスでも機能分解木と同様に全体機能と部分機能の機能属性間の依存関係が考えられる.

機能属性のノードの下に表示されている橙色のノードは機能を達成している材料の属性であり, 上下に並んだ機能属性と製品の属性は依存関係にある. たとえば図2左上の「エネルギー状態を下げる」という機能の機能属性「降下エネルギー量」は, その製品に使われている材料の「バンドギャップ幅」という属性に依存していることを示している.

(3) 特性依存木

図4のように, 機能分解木から機能属性の依存関係のみを取り出したものを特性依存木と呼ぶ. 特性依存木を用いることで機能分解木に比べ, 機能属性の依存関係の一覧性が高くなる. 特性依存木を参照することで, 最上位の機能属性を変化させるのに, どの機能属性を変化させればよいかということが分かる.

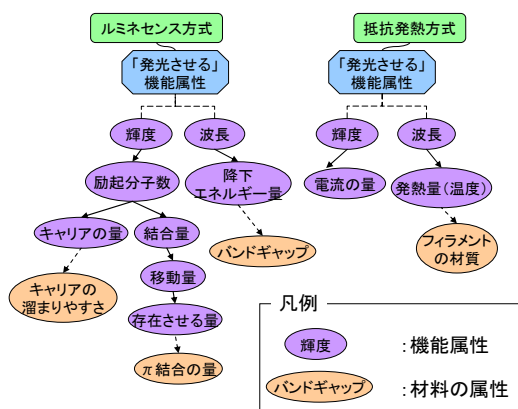


図4 特性依存木

3.3 材料の性質の分類と機能・プロセスとの関係

特性依存木の最上位の機能属性の値を定量化したものが前章で述べた保有特性と考えられ, その機能属性の依存関係をたどって下位に降りていくと, 最終的には製品に用いられている材料の基本属性や反応関係属性にたどり着く.

このように機能分解木と製造プロセス木の依存関係をたどっていくと, 製品の機能を改善するためにはどのような属性を持つ材料を使用すれば良いかわかる. さらに, そのような属性を持つ材料を製造する方法は, 製造プロセスの機能属性の依存関係をたどっていくと分かるようになると考えられる. つまり, 「システムとしての機能」と「材料の特性, 属性」との関係を一貫したフレームワークで組織的に, かつ, 連続性をもって記述することが容易になると考えられる.

4. まとめ

本論文ではいくつかの意味が混在した機能という概念をオントロジー工学的観点から考察し, 材料の機能の分類を試みた. 分野ごとに様々な意味で用いられる「機能」という言葉を材料の「性質」という概念を出発点としてオントロジー工学の視点から「属性」「特性」という概念に分類した. これにより, 異なる分野間でのナノテク材料知識の共有・再利用の推進に貢献することになると考えられる.

また, 製品の機能と製造プロセスとの関係を, 機能属性の依存関係をたどることにより明らかにできるという可能性を示した. 製品の機能と製造プロセスとの関係が明らかになることにより, 製品設計者は製品の機能改善のためにどのような材料を用いれば良いのかが容易に分かるようになると考えられる. 同様に材料設計者も求める材料の製造プロセスをどのように作れば良いのかが容易に分かるようになると考えられる.

今後の課題としては, ナノテク材料知識の中心である「機能」・「構造」・「プロセス」のうちの構造について知識を体系化の対象とし, ナノテク材料知識の体系化についてさらなる検討を進める

参考文献

[NMC 04]「材料技術の知識の構造化」プロジェクト Web サイト, <http://nmat.t.u-tokyo.ac.jp/>
 [古崎 04]古崎,他,ナノテク材料技術の知識の構造化プロジェクトにおけるオントロジーの利用,人工知能学会研究会資料,SIG-SWO-A303-03
 [Pahl 95]G.Pahl, W.Beitz, K.Wallace(編),設計工学研究グループ(訳):工学設計-体系的アプローチ,培風館,1995
 [高橋 02]高橋,他,異分野共有を目指した機能的設計知識の組織化の枠組み,第16回人工知能学会全国大会,2C3-07,2002
 [來村 02]來村,溝口,オントロジー工学に基づく機能的知識体系化の枠組み,人工知能学会誌,17(1),pp61-72,2002
 [來村 03]來村,他,機能的設計知識記述・共有の枠組みとその実用展開,第17回人工知能学会全国大会,1E1-04,2003
 [垂見 03]垂見,古崎,來村,渡邊,溝口,ナノテクノロジー材料合成プロセスに関する機能的知識の体系化の試み,第17回人工知能学会全国大会,1G2-04,2003
 [新原 02]新原,平尾(編),セラミック系ナノコンポジット,ナノマテリアル最前線,化学同人,2002
 [辻野 04]辻野貴志,ナノエレクトロニクス.jp
<http://www.nanoelectronics.jp/>