

方式知識蓄積機能・過去の設計過程の保存機能を用いた

統合的設計支援システムの開発

Development of Integrated Design Supporting System with the Functionality to Store Functional Way Knowledge and Design Cases

垂見 晋也 古崎 晃司 來村 徳信 溝口 理一郎
Shinya TARUMI, Kouji Kozaki, Yoshinobu KITAMURA, Riichirou MIZOGUCHI

大阪大学産業科学研究所

Institute of Science and Industrial Research, Osaka University

In the recent material research, much work aims at realization of "functional material" by changing structure and/or manufacturing process with nanotechnology. However, knowledge about the relationship among function, structure and manufacturing process is not well organized. So, designers have to consider a lot of things at same time. It is very helpful for them to support their design process by a computer system. In this article, we aim to develop a conceptual design supporting system for nano-material. Firstly, we investigate the specifications of such supporting system. And, we outline functionality of the system with some real examples.

1. はじめに

材料設計では、「(その材料で)目指す機能をどのように達成するか」、「その機能で注目する属性をどのように向上させるか」、「その時に用いる材料種はどのようなものがよいか」、そして、「そのような材料を作るには、どのような製造プロセスを用いればよいか」など、様々なことを同時に検討する必要がある。その組み合わせは膨大な数になり、しかも各検討事項は密接に関連している。さらに、その設計結果が適切であるかを確かめるために行う実験まで含めると、適切な解を得るには大変な労力を要する。このような材料設計を計算機を用いて効率的に支援することができれば、材料開発の効率化に繋がり、新規材料の開発に貢献することが期待される。

本研究はこのような材料設計を概念レベルで支援するシステムの開発を目的としている。このようなシステムを実現するためには、材料の機能や製造プロセスに関する知識をシステムに体系的に格納し、それらの知識を効果的に利用して設計を行うことが重要となる。そこで本研究では、先行研究で開発された機能概念オントロジーに基づいた機能分解木を用いて、設計支援システムの開発を行う。2章では、本研究における設計支援の概要と、システムに要求される機能について述べる。3章では、このような仕様に基づいて開発した、システムに格納する知識を記述するための枠組みについて述べる。そして、4章では、その考察に基づいて開発した材料設計支援システムを、材料研究者の協力を得て作成した適用事例とともに述べる。

2. 材料設計支援システムの要求仕様

ここでは、本研究で開発するシステムにおける材料設計の支援の方法と、それに必要な機能について述べる。本システムで行う材料設計は、「薄膜の厚さは n nmにする」や「レーザーを

秒間照射する」といったような、具体的な数値を設定するパラメータ設計ではなく、「ある機能をどのように実現するか」や「材料の製造プロセスはどの方法を用いるか」といったような概念設計を対象としている。

2.1 機能分解木を用いた概念設計

本システムでは、材料の機能や製造プロセスの概念設計を、「機能概念オントロジーに基づく機能分解木」を構築することで行う。機能分解木とは、人工物の機能発揮に関する知識を、機能概念オントロジーで定義された「機能概念」と「方式知識(以降、方式と呼ぶ)」を用いて表したもので、「ある機能が複数の部分機能によって達成されていること」を木構造で表す。機能概念とは、人工物の機能を対象領域によらない一般的な形で概念化したものである。方式とは、ある機能とそれを達成する部分機能系列が、どのような背景知識によって達成関係を満たしているかを概念化したものである。部分機能はさらに機能分解することができ、機能分解を繰り返すことで、詳細に機能構造を記述することができる。ここで、ある機能を達成する方式は、一般に複数存在するので、設計者は複数の候補となる方式の中から適切な方式を採用することを繰り返すことで機能分解木を構築する。この「複数ある方式から1つの方式を採用する」という行為は概念設計段階における設計行為のひとつに相当し、本研究ではこのような機能分解木の構築過程を支援することで概念設計の支援を行う。以下、本システムで機能分解木を用いた概念設計を行うために必要な機能について述べる。

(1) 方式知識蓄積機能

「複数の方式の中から1つの方式を採用する」ためには、まず、その機能を達成する方式が、システムに適切な形で格納されている必要がある。適切な形とは、方式が一般化され「ある機能を達成する方式」に関する知識という形で体系的に蓄積されていることである。ここで、機能を(機能概念オントロジーで定義された)機能概念で記述することで、システムはドメインに囚われることなく方式を設計者に提示することができる。そして、設計者は様々なドメインの方式を検討することができるため、柔軟な機能・製造プロセスの設計を行うことができる。

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 大阪府茨木市美穂ヶ丘 8-1
Tel: 06-6784-8416 Fax: 06-6879-2123
e-mail: tarumi@ei.sanken.osaka-u.ac.jp

(2) 過去の設計過程の保存機能

「複数の方式の中から、1つの方式を採用する」と行為を繰り返して構築された機能分解木に、不採用とした方式もそのまま残したものを、特に「汎用機能分解木[來村 02]」と呼ぶ。不採用とした方式を残しておくことで、「何故その方式を採用・不採用としたか」という、「どのように検索し、設計を行う過程で考慮した候補(方式)」を表すことができる。よって、構築された汎用機能分解木を保存するということは、過去の設計過程の情報の重要な一部を保存すると言える。この際、それぞれの方式を採用・不採用した理由を汎用機能分解木と合わせて保存すると、別の材料設計時に、「その方式が検討された過去の事例」として、設計者が方式の採用・不採用を決定する参考となる。

2.2 材料設計に向けた要求仕様

材料設計においては、「材料が達成する機能で特に注目している属性」の改善や向上を目的としていることが多い。また、材料設計では、材料の製造プロセスが、その材料が達成する機能に影響を与えることが多いため、材料が達成する機能とその材料の製造プロセスを統合的に設計しているという特徴がある。これらの影響は、属性と属性間の依存関係に顕著に現れる。

このことから、材料設計には

- 属性と属性間の依存関係の管理
- 材料の機能と製造プロセスを統合した設計

が必要となる。しかし、ここで挙げた2つは、材料固有の概念ではないため、本システムの適用範囲を限定するものではない。

3. 機能・製造プロセス知識統合的記述枠組み

前節で述べた本システムの要求仕様を満たすためには、まず、材料の機能と製造プロセスとそれらの依存関係に関する知識を体系化する必要がある。そのためには、それらに関する知識を体系的に記述できる知識の記述枠組みが必要となる。ここでは筆者らが開発した、これらの知識を体系的に記述する「機能・製造プロセス知識統合的記述枠組み[垂見 04]」について述べる。本枠組みの全体像を図1に示す。

本枠組みはこれまで筆者らが開発してきた「機能的知識共有枠組み[來村 02, 03]」を拡張したものである。これまでの枠組みでは、人工物の機能発揮に関する知識を機能概念オントロジーに基づき、「方式概念」を用いた機能分解木で記述する。本枠組みでは、この枠組みを材料やデバイスの製造プロセスに関する知識も記述できるように拡張した[垂見 03]。機能分解木と同じ枠組みを用いて材料やデバイスの製造プロセスに関する知識を記述することで、機能と製造プロセスの双方に関する知識を一貫性のある視点から把握することができる。

また、材料分野においては、属性間の依存関係が非常に重要視されるという理由から、機能分解木に「機能属性」と「属性間の依存関係」を記述できるように拡張した。これらに加え、機能と製造プロセスの関係性を明確にし、属性間の依存関係の一

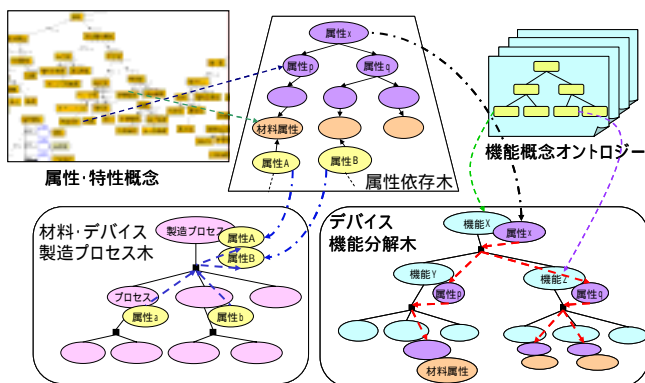


図1 機能・製造プロセス知識統合的記述枠組み

覧性を高めるという目的のもと、「属性依存木」という枠組みを新たに導入した。それぞれの属性は本記述枠組みの開発と並行して整理した属性概念[垂見 04]に基づいて記述される。

4. 設計支援システムの開発

4.1 システム構成

本システムは、「設計支援システム」と「知識管理サーバ」の2つのシステムから構成される(図2)。

材料設計者は、設計支援システムを用いて材料の機能や製造プロセスの機能分解木を構築することで、材料設計を行う。この際、設計支援システムは、方式検索システムを介して知識管理サーバに蓄積された方式知識や過去に構築された機能分解木(設計過程の結果)にアクセスし、必要な情報を提示することで、設計支援を行う。本システムで構築された機能分解木は、新たな設計事例として知識管理を行う。本システムで構築された機能分解木は、新たな設計事例として知識管理サーバに蓄積され、今後の設計に利用される。知識管理サーバに蓄積されている方式知識は、機能概念オントロジーに基づいて記述されており、これらの知識の管理は、知識管理者がオントロジー構築・利用環境「法造」(<http://www.hozo.jp>)を用いて行う。なお、知識管理サーバの実装には、法造で構築したオントロジーやモデルを操作するためのAPIを用いている。

また、機能分解木だけでは表しきれない詳細な情報については、本システムと外部の材料データベースやシミュレータと連携させることで、より高度な設計支援を行うことも想定しており、Web上のコンテンツとの連携を行うためのシステムの開発を進めている。

4.2 本システムを用いた材料設計

本システムでは、新規材料の設計と既存材料の改良設計の両方を支援する。以下の部分では、それぞれの設計について、本システムがどのように支援を行うかを示す。

本システムでの新規材料の設計は、

- 材料の機能を設計(機能分解木の構築)
- 選択した方式が適用できる材料の属性から、製造プロセスで注目する属性を決定
- 決定した属性に注目して製造プロセスを設計(製造プロセス木の構築)
- 必要に応じて改良設計を行う(機能分解木・製造プロセス木を変更する)

という4つの段階を用いて行う。以降、本システムがそれぞれの段階でどのような支援を行い、設計者がどのように材料設計を行うのかについて、例を通して述べる。

(1) 材料の機能を設計

設計者は必要とする機能を達成する方式を「方式検索画面(図3)」を用いて検索する。この画面には知識管理サーバに蓄

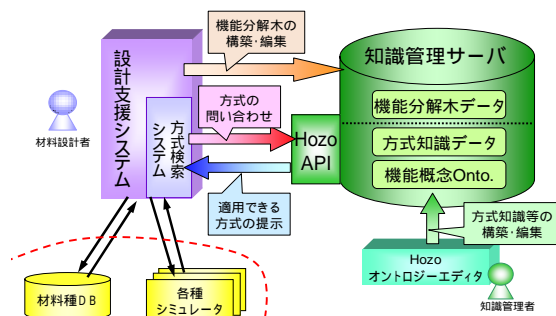


図2 材料設計支援システムのシステム構成

積された方式から、指定した機能を達成する方式がツリー形式で表示される(図3)。また、それぞれの方式の部分機能や機能属性、属性間の依存関係が3章で述べた形式で図3の部分に、方式の性質などを表す情報(以降、方式情報と呼ぶ)が図3の部分にテーブル形式で表示される。

この例では「磁性を制御する」という機能を達成する方式として、材料を歪ませることで磁性を制御する「歪み効果方式」と、キャリア濃度を変化させることで磁性を制御する「キャリア制御方式」が知識管理サーバに蓄積されていることが分かる。

方式検索画面で表示した方式は、その設計において採用する方式の候補として、設計支援システムの主画面に反映される。そして、主画面でどの方式を採用するかを選択し、さらにそれぞれの方式の部分機能を達成する方式を検索・選択するという操作を繰り返すことで、図4のような結果を得る。このように設計者がある機能を達成する方式を検索し、本システムが提示した方式を機能分解木に追加する、という操作を繰り返すことで、材料の機能設計行為を進める。

この過程において、システムが提示した方式の中から、1つの方式を適切に選択することが、本システムにおける設計において重要となる。その選択の指針を与えるために、本システムでは、前節で述べた属性間の依存関係、方式の性質や制約などを表す方式情報、その方式を用いている過去の設計事例の3種類の情報を提示する。ここで、これら3つが設計者にどのような方式選択の指針を与えているかを述べる。

属性間の依存関係

属性間の依存関係をたどることで、設計する機能や製造プロセスで注目する機能属性(目的属性と呼ぶ)と依存関係にある部分機能の属性が分かる。ここで、属性間の依存関係は方式により異なるので、目的属性と依存関係にある部分機能の機能属性も異なる。よって、その部分機能の属性がその部分機能において変化させやすいかなどは、採用する方式を決める判断基準の一つとなる。例えば、図4で示したように、「キャリア濃度を制御する」の機能属性「キャリア濃度」は、機能を達成する方式として、「キャリア注入方式」を採用した場合は「キャリア量」に依存し、「電界制御方式」の場合には「電界の強さ」に依存する。従って、「キャリア量」よりも「電界の強さ」の調整が容易な場合は、制御のしやすさを基準とすると「電界制御方式」を選択する方がよいと考えることができる。

また、この段階で判断が困難である場合は、提示されたそれぞれの方式の部分機能をさらに展開し、属性間の依存関係をたどっていくこともできる。

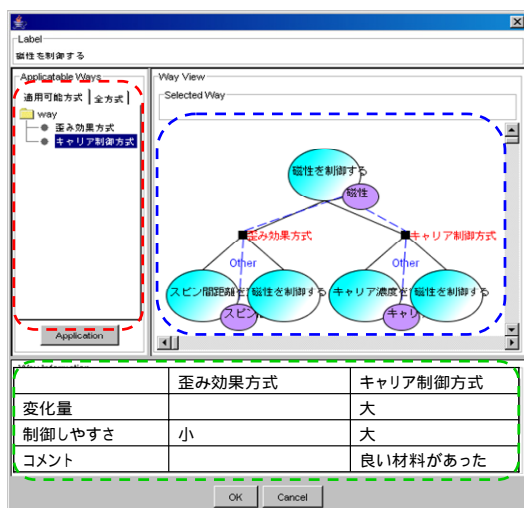


図3 方式検索画面

方式情報

本システムでは、各方式の性質を、その方式の持つ属性を中心とした方式情報として提示する。設計者はそれぞれの方式の性質を比較することで、採用する方式を決める。例えば図3の例では、歪み効果方式は「制御しやすさ:低い」ということが、キャリア制御方式では「変化量:大」、「制御しやすさ:高い」の他に、「良い材料があった」ということが、方式情報のテーブルから分かる。この例では、目標としている「磁性を制御する」という機能において、制御のしやすさが高いという点から、「キャリア制御方式」を採用したと考えることができる。

このように、方式情報は方式選択において参考にされることが多く、サーバに蓄積する方式により適切な方式情報を記述することが重要である。そこで本システムでは、次のような方式知識の記述者が方式情報を記述するための枠組みを用意している。また、機能発揮と製造プロセスは同じ枠組みで記述できるため[垂見 03]、システムが提示する際には、区別せずに提示する。

A) 出力物の性質: 出力物に関する情報

A1: 機能発揮 例) 波長: 3.0 μm (レーザー), 増幅率: 高い (増幅器)

-副産物 例) 切り屑

A2: 製造 例) 出力物の表面: 荒い,

-副産物 例) acac(有機物)

B) B) プロセスの性質: 機能発揮プロセスと製造プロセスの性質

B1: 機能発揮 例) 発光効率: 高い

コスト: ランニングコストに関する物 例) 入力物の費用: 大,

B2: 製造 例) 反応時間: 長い, 制御しやすさ: 低い

コスト: 製造コストに関する物 例) 装置のコスト: 高い, 装置: レーザー, 入力物(材料)の費用: 大,

C) 対象物や装置に関する制約条件: その方式で用いる入力物や装置に関する制約

C1: 機能発揮

C1-a) 対象物(入力物)に関する制約 例) 対象物の強度: 3.0kg/mm²以上

C2: 製造

C2-a) 対象物(入力物)に関する制約 例) 入力物: 金属不可

C2-b) 装置に関する制約 例) 装置の重量: 重い

D) その他の情報

例) 「良い材料があった」、「半導体的な考え方である」

これらの分類は、本研究で筆者らが2人の材料研究者の協力を得て、材料の機能や製造プロセスの機能分解木を構築した際に、方式を選んだ理由をインタビューした内容を分類したものである。

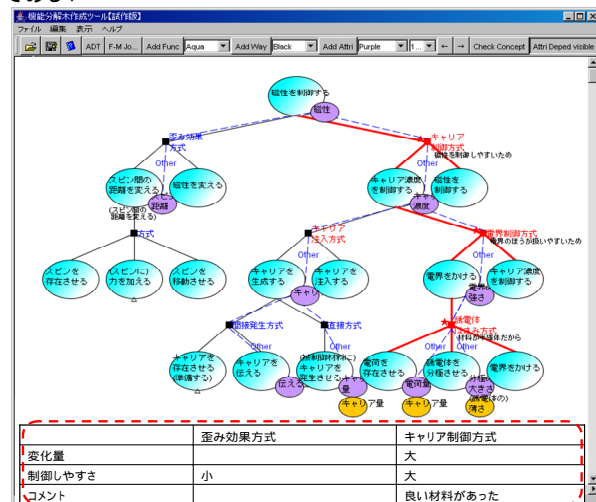


図4 材料設計支援システムの主画面

過去の設計事例

提示された方式が、「過去にどのような設計事例で検討されたか」ということを参照することで、その事例において、その方式がどのような理由で採用された(不採用になった)かが分かる。これにより、その方式が現在設計中の材料にも適用できるかどうかを判断することができる。

材料設計者は、属性間の依存関係や方式情報などを用いて、採用する方式に採用理由を記述する。

(2) 材料の属性から製造プロセスの属性を決定

機能分解木の構築が終わると、その機能分解木において、属性間の依存関係を辿ることで、採用した方式で機能発揮ができる材料の属性を調べることができる。図4では最上位機能「磁性を制御する」の機能属性「磁性」に注目し、採用した方式における属性間の依存関係を辿っていくことで、「磁性」は最下層の機能の属性「電荷量」と「分極の大きさ」に依存することが分かる。そして、これら2つの機能属性は、その機能を達成している材料の属性「(誘電体の)薄さ」と「キャリア量」に依存しており、製造プロセスではこの2つに注目して設計を行う。

なお、ここで具体的な材料種の選択は本システムでは行わず、本システムと外部のデータベースをリンクさせ、そこから本システムで提示する指針に沿って材料種の選択を行う。この際、必要となる材料種を決定するための枠組みが必要となるが、これは現在検討中である。

(3) 材料の製造プロセスの設計

材料を製造するプロセスの設計は で行った機能達成方式の選択と同様の方法で行う。では材料に持たせる機能の機能属性に注目して機能達成方式を採用したが、製造プロセスの設計では、 で決定した属性に注目して製造プロセスの設計を行う。

(4) 既存材料の改良設計

目的属性の値を改善したいという場合、必要ならば材料の機能や製造プロセスの改良設計を行う。材料が発揮する機能属性の値を改善させる方法は、

- a) その属性と依存関係にある部分機能の機能属性を調整する
- b) 材料の機能を達成している属性を別の方式と代替するという2種類がある。

例えば、図5において、機能属性「磁性」は「キャリア制御方式」では部分機能「キャリア濃度を制御する」の機能属性「キャリア濃度」に依存関係があり、キャリア濃度を变化させることで、上位機能の機能属性「磁性」を变化させることができる。また、「キ

ャリア濃度を制御する」の段階で機能属性「キャリア濃度」を变化させることが困難であれば、「キャリア濃度」と依存関係にある機能属性(「電界制御方式」では部分機能「電界をかける」の機能属性「電界の強さ」)を变化させることで、「キャリア濃度」を变化させることができる。それも困難であれば、本システムでは、機能と製造プロセスの間の依存関係も扱っているので、機能と製造プロセスの依存関係を辿っていき、依存関係で繋がった製造プロセスの属性を变化させることで、目的属性を变化させることができる。このように属性間の依存関係を再帰的に辿ることで、最終的に材料に持たせる機能の注目する部分機能の値を变化させることができる。

一方、属性の依存関係は方式により異なるので、方式を替えることで注目する機能属性と依存関係にある部分機能の機能属性が変わるため、方式を代替することで依存関係にある、目標とする機能属性の値を变化させるということもできる。図4で示したように、「キャリア濃度を制御する」の機能属性「キャリア濃度」は、機能を達成する方式として、「キャリア注入方式」を採用した場合は、「キャリア量」に依存し、「電界制御方式」の場合には「電界の強さ」に依存する。従って、電界制御方式で「キャリア濃度」の調整が困難であれば、キャリア注入方式に代替するということができる。

5. まとめ

本研究では、機能概念オントロジーに基づく機能分解木を用いた概念設計支援に必要な機能や、方式選択の指針について考察し、設計支援システムを開発した。本システムの特徴は、方式蓄積機能や、過去の設計過程の保存機能を用いた、効果的な方式選択支援が行える。今後、本システムを材料研究者に使用してもらい、本システムの効果の検証を行う。また、方式間の依存関係や属性概念オントロジーの開発など、より高度な支援を行うための考察を行う。

謝辞

本研究を進めるにあたり、材料の機能や製造プロセスの機能分解木の構築や、それに関連したインタビューなどに協力を頂いた、大阪大学産業科学研究所 田中秀和助教授、中山忠親助手(現在、長岡技術科学大学)に感謝します。

参考文献

[来村 02] 来村,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
 [来村 03] 来村,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,来村,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
 [垂見 04] 垂見,古崎,来村,渡邊,溝口,知識構造化のためのナノテック材料の特性と機能に関するオントロジー的考察,第18回人工知能学会全国大会,1G3-02
 [垂見 05] 垂見,古崎,来村,田中,川合,中山,新原,溝口:オントロジー工学に基づくナノテック材料の機能・製造プロセス知識統合的記述システムの開発,情報処理学会研究報告(2005-ICS-139), pp151-156, 2005.
 [Kanki 03] T. Kanki, Y.-G. Park, Hide. Tanaka, and T. Kawai, Electrical-field control of metal-insulator transition at room temperature in $Pb(Zr_{0.2}Ti_{0.8})O_3/La_{1-x}Ba_xMnO_3$ field-effect transistor, Appl. Phys. Lett 83 (2003) 4860-4862

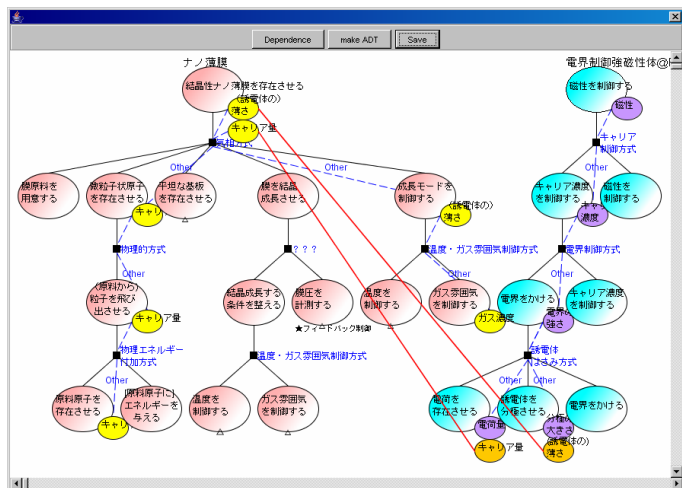


図5 機能・製造プロセス統合画面