

機能・製造知識統合的記述システムの開発と

ナノテク材料設計支援への展開

Development of an Editing System of Integrated Knowledge Function/Manufacturing Process and Its Application to Supporting Nano-Materials Design

垂見 晋也 古崎 晃司 來村 徳信 田中 秀和 川合 知二
 Shinya Tarumi Kouji Kozaki Yoshinobu Kitamura Hidekazu Tanaka Tomoji Kawai

中山 忠親 新原 皓一 溝口 理一郎
 Tadachika Nakayama Kouichi Niihara Riichiro 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. In this article, we aim to develop a modeling framework of functional structure and manufacturing process including the relationship. We also aim at building an editing system for Function-Manufacturing Process Integrated Knowledge which is based on this framework. In addition, we investigate nano-material design support system with this framework.

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。その際必要となるのが、材料の「機能」-「構造」-「製造プロセス」とそれぞれの間の依存関係に関する知識である[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。これは材料の機能や製造プロセス、これらの依存関係に関する知識を記述するための指針や記述システムが無く、知識が記述者の研究領域や背景に依存して記述されているためであると考えられる。

本稿では材料の機能や製造プロセスとそれらの依存関係に関する知識を記述するための枠組みと、この枠組みに基づいて開発した知識の記述システムについて述べる。また、開発した記述システムを用いて記述された知識の利用法として考えられる、ナノテク材料設計支援への展開について述べる。

2. 機能・製造プロセス知識統合的記述システム

2.1 機能・製造プロセス知識統合的記述枠組み

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」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」を記述する枠組み拡張した。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貫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。

以降、本枠組みの各構成要素について、要点を述べる。

(1) 機能的知識共有枠組みと製造プロセスへの拡張

機能分解木とは対象となる人工物の機能の達成関係を木構造で表現したものである。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

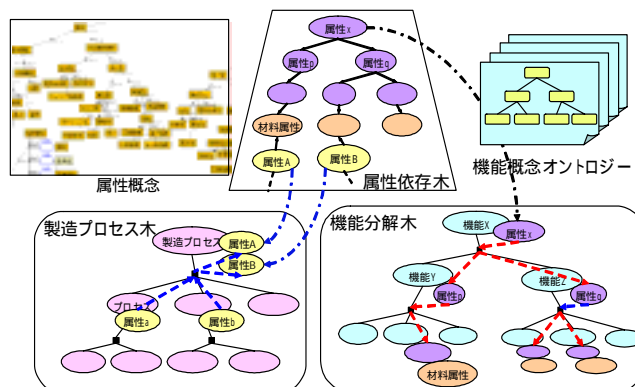


図1 機能・製造プロセス知識統合的記述枠組み

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

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」を示す吹き出しに、用いられている方式名、原理等を明記する。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。

ここで、ある機能を達成する方式は通常複数考えることができる。例えば「発光する」という機能の場合、それを達成する方式として、「抵抗発熱方式」や、「放電発光方式」などがある。本枠組みではこのような方式選択の候補を、機能分解木に OR 木として記述し、方式選択の結果が設計者の思考過程や設計意図として現れ、3章で述べる設計支援に用いることができる。

本枠組みにおいて材料の製造プロセスに拡張する。対象となる材料・デバイスの製造プロセスの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材料の製造プロセスを記述することができる[垂見 03]。本研究では機能分解木と区別するために、本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。

(2) 機能属性と属性間の依存関係

例えば「発光する」という機能において、出てきた光の「輝度」や「波長」は発光するという機能達成の結果に関する属性と考えられる。このような機能達成結果を表す属性を「結果属性」と呼ぶ。一方、「(発光)効率」のように機能の達成過程を表す属性を「過程属性」と呼ぶ。このような機能に関する属性を「機能属性」と呼び、機能分解木上では機能ノードの下に楕円形ノードで表される。全体機能の機能属性は、部分機能の機能属性と依存関係を持つ。例えば、「発光する」の機能属性「輝度」は部分機能の「(分子を)励起させる」の機能属性「励起分子数」に依存していることが知られている。また、機能属性の依存関係は選択する方式によって異なるため、機能属性間の依存関係は方式の性質の一部として定義できる。

(3) 属性依存木と機能・製造プロセスとの繋がり

機能分解木において、最上位機能はそのシステム全体として発揮しているが、最下層の機能はデバイスや材料が直接発揮している。機能分解木の機能属性の依存関係を辿っていくと、最下層の機能属性はデバイスや材料の属性に依存しており、そのような属性をもつデバイス・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辿っていくことで知ることができる。このような属性の依存関係のつながりを、機能分解木および製造プロセス木から取り出したものを「属性依存木」と呼ぶ。「属性依存木」を用いることで、属性間の依存関係の一覧性が向上し、材料の機能分解木と製造プロセスとの関係と、それぞれの木の属性間の関係を一貫したフレームワークで連続性をもって記述

することができる。

2.2 機能・製造プロセス知識統合的記述システム

ここでは前章で述べた機能・製造プロセス知識統合的記述枠組みに基づいて開発した、知識記述システムについて述べる。本記述システムでは、機能属性について拡張した機能分解木および製造プロセス木を、それらの関係を管理しながら統合的に記述できる。さらに、構築した機能分解木から機能属性とその依存関係を自動的に抽出、表示することができる。

本記述システムの画面構成は、メインパネル、属性依存木を表示する属性依存木表示パネル、および機能分解木と製造プロセス木の関係を表示する機能・製造プロセス統合パネルから成る(図2)。

メインパネルでは機能分解木ノードとリンクを用いてグラフィカルに表示・編集する。機能分解木は、機能を表す機能ノードと、方式を表す方式リンク、機能属性を表す機能属性ノード、属性間の依存関係を表すリンクで表示される。属性依存木表示パネルではメインパネルで記述・編集された機能分解木の属性依存木を表示する。ここに表示される属性依存木は機能分解木から機能属性ノードと属性の依存関係のリンクを、システムが収集することで自動的に構築される。機能・製造プロセス統合パネルでは、機能分解木と製造プロセス木で記述された機能属性間の依存関係の表示・編集を行う。機能分解木と製造プロセス木の2つの木は左右に並んで表示され、属性間の依存関係の記述は、依存関係にある2つの属性を選択することで行われる。このパネルで表示・編集した機能分解木と製造プロセス木の関係や2つの木にまたがる属性間の依存関係は、システムで管理される。

3. ナノテク材料設計支援への展開

3.1 材料設計支援システム

ここでは本研究の最終的な目標としている材料設計支援システムについて述べる。本システムは格納された知識を必要に応じて、材料設計者に提示することで概念レベルの設計支援を行う。

(1) システム構成

本システムは次のシステムから構成される(図3)。

1. 機能・製造プロセス知識統合的記述システム
2. 方式サーバ
3. 方式提示システム
4. 材料種 DB・各種シミュレータなどの外部システム

前章で述べた機能・製造プロセス知識統合的記述システム(以

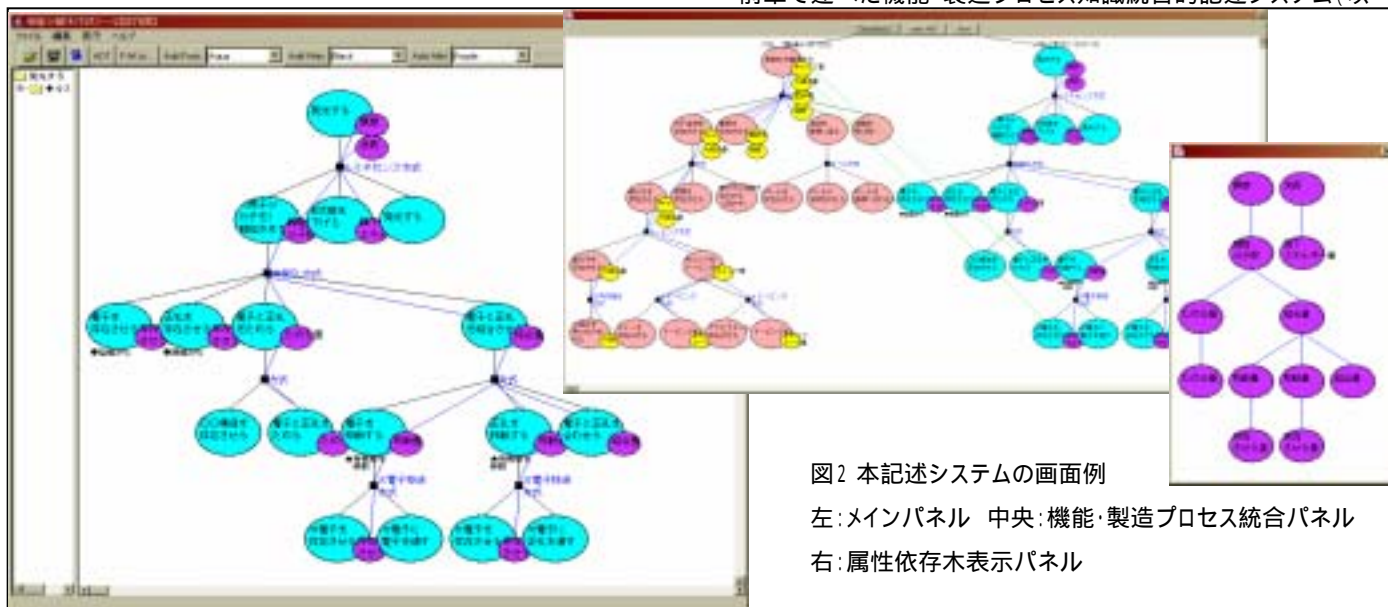


図2 本記述システムの画面例

左:メインパネル 中央:機能・製造プロセス統合パネル

右:属性依存木表示パネル

降、記述システムと呼ぶ)によって記述された知識は、方式を単位とした知識に分解され、「方式サーバ」に体系的に格納される。記述システムで記述された機能分解木や製造プロセス木は、記述形式はドメインに依らない形になっているが、その木の内容はドメイン固有なので、記述された木そのものを分野を越えて共有・再利用することは難しい。しかし、記述された機能分解木や製造プロセス木を方式単位で分解し、方式を一般化することで、(方式サーバに)特定分野に限定されない「ある機能を達成する方式」に関する知識として格納することができる。これは記述された機能分解木や製造プロセス木で用いられる「機能」や「プロセス」が、ドメインに依存しない機能概念オントロジーに基づき記述されていることによる。オントロジーに基づいた機能や製造プロセスごとに方式を格納することで、記述した知識を体系的に格納することができる。「方式提示システム」はある機能・製造プロセスを達成する方式を「方式サーバ」から検索し、該当する方式群を提示する機能をもつシステムである。本システムは概念レベルの設計支援を行うが、外部シミュレータやデータベースと接続することで、(材料設計の際、)具体的なパラメータ設計や材料種の支援をすることも想定している。

(2) 材料設計支援の概要

- 本設計支援システムは、
 - 材料の機能達成方式を選択
 - 選択した方式が適用できる材料を選択
 - その材料の製造プロセスを選択

という3つの段階を用いて、材料設計の支援を行う。以降、本支援システムがそれぞれの段階でどのような支援を行い、材料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。

材料の機能達成方式の選択

まず、設計者は材料に持たせる機能を達成する方式を、システムに格納された知識から検索し、システムが提示した方式の中から1つを選択する。図4の例では「磁性を制御する」という機能を達成する方式を調べると、材料を歪ませることで磁性を制御する「歪み方式」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」があることが分かり、ここでは「キャリア制御方式」を選択した。さらに、「キャリア制御方式」を用いて磁性を制御する際の部分機能である「キャリア濃度を制御する」を達成する方式として「電界制御方式」を選択し、以下同様にして図4のような方式選択の結果を得た。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の中から1つの方式を選択する、ということを繰り返すことによって材料の機能設計を支援することができる。この過程において設計者は本システムが提示する機能属性や属性間の依存関係を参照することにより、材料にもたせる機能の機能属性に注目してより適切な材料の設計を行うことができる。その際、材料が発揮する機能属性は、

- a) その属性と依存関係にある部分機能の機能属性の値を調整する

- b) 材料の機能を達成している方式を別の方式と代替するという、2種類の方法で設計される。

例えば、図4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、キャリア濃度を変化させることで、上位機能の機能属性「磁性」を変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」を変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」)を変化させることで、「キャリア濃度」を変化させることができる。このように依存関係にある部分機能の機能属性、さらにその機能属性と依存関係にある機能属性と、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変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、機能達成に用いる方式を代替することで依存関係にある部分機能の機能属性の値を変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考え方ができる。この際、「既に選択した方式Aは方式Bと依存関係がある」、「方式Cを選んだら、Cの部分機能では方式Dしか選べない」等の付加情報を方式群と共に提示することで、より効果的な材料設計支援を行うことができると考えられる。

このように本システムでは、機能属性と属性間の依存関係を考慮に入れることができるので、材料に持たせる機能の機能属性に注目しながら、材料の機能達成方式を選択し、設計することができる。なお本システムでは概念設計を行うことを目指しているため、機能属性の具体的な数値を決定すること、すなわちパラメータ設計の支援は行わない。それぞれの段階におけるパラメータ設計は本システムにリンクさせた外部シミュレータによって行うことを想定している。

方式が適用できる材料の選択

によってできあがった方式選択の結果を表す機能分解木において、機能属性の依存関係を辿ることで、選択された方式で機能発揮ができる材料の性質(属性)を調べることができる。本システムでは、選択した方式ではどの属性に注目して材料を選択すれば良いか、という材料選択の指針を設計者に提示する。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、選択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、この例で選択した方式では、材料の属性として

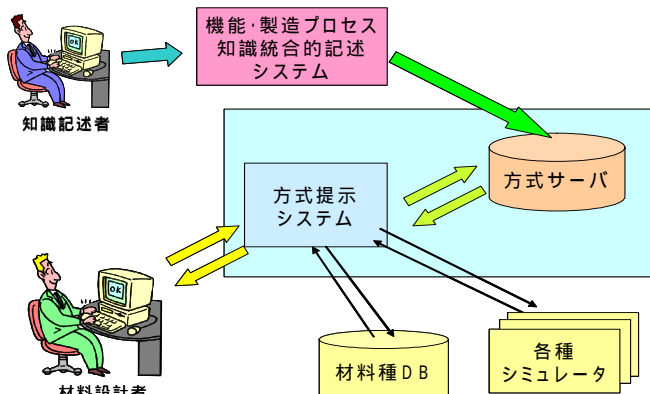


図3 材料設計支援システムの概要

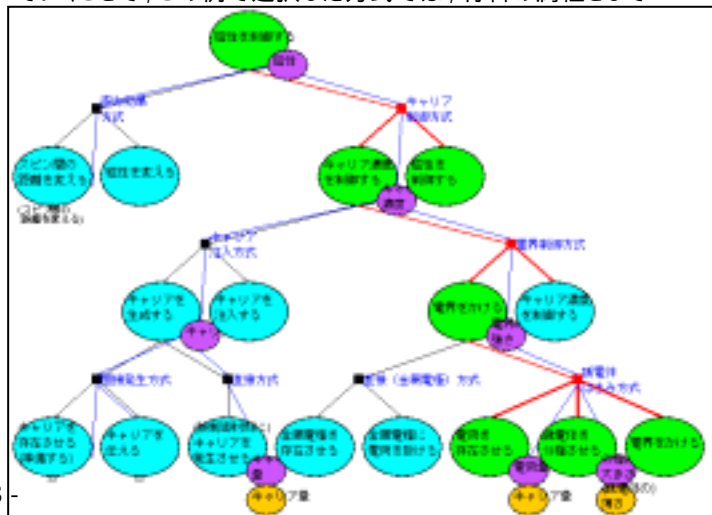


図4 材料の機能達成方式の選択結果

「(誘電体の)薄さ」と「キャリア量」に注目すればよいことが分かる。

ここで具体的な材料種の選択は本システムでは行わず、本システムとリンクしている外部のデータベースから本システムが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。

材料の合成プロセスの選択

材料を合成する製造プロセスの設計は 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選択したが、製造プロセスの設計では でシステムが提示した材料の属性に注目して、製造プロセスの選択・設計を行う。図4の例ではこの材料の属性は「(誘電体の)薄さ」と「キャリア量」が重要であるので、製造プロセスの選択では、この2つの属性に注目して選択すればよいことが分かる。

このように本システムは機能・製造プロセス知識統合的記述枠組みに基づいているため、材料の機能達成方式の選択・材料種の決定・製造プロセスの選択の3つの段階で、機能属性と属性間の依存関係をたどり、連続的に材料設計支援を行うことができる。

3.2 材料設計支援の予備的検証

本研究では本システムの開発に先立ち、本システムが提供する設計支援方法の予備的検証として、材料系分野の専門家の協力を得て、実際の材料開発の具体事例を、記述システムを用いて記述した。実際の材料設計過程を本システムが提供する設計支援方法に沿って追試的に記述することを通して、本記述枠組み及び、記述システムの有用性と、本システムが想定する設計支援が有効であるか検討した[垂見 05]。以下、その結果の概要を述べる。

(1) ナノ粒子合成プロセスの改善例

ナノ粒子(複合体)の合成プロセスの改善例を用いて予備的検証を行った。この例では金属 Zr 気体を存在させるために、物理的手法(PVD 法)である「抵抗発熱方式」から、化学的手法(MOCVD 法)である「有機金属錯体昇華方式」に代替することで、合成プロセスの改善ができたことを、本記述枠組みで記述することができた。このようにある機能(製造プロセス)を達成する方式を、本システムに格納された知識の中から検索・提示し、より適切な方式に代替することで新たな製造プロセスの発想を支援することができると考えられる。

(2) 電界制御強磁性体ナノ薄膜の設計例

ここでは、新規磁気メモリ材料となるナノ薄膜の設計を具体事例[Kanki 03]として、方式選択による設計支援の追試的に記述することで本システムの予備実験を行った。

この例では、前節で述べた材料設計の段階のとおり、磁性の制御機構を選択し(), 選択した方式が適用できる材料の選択を行い(), 選択した材料の製造プロセスを選択する()という3つの材料設計で用いた知識を、本枠組みを用いて記述できることを確認した。

3.3 評価と今後の課題

前節の具体事例をもとに追試的に記述することを通して、知識記述の協力を得た材料分野の専門家より、機能・製造プロセス知識統合的記述枠組みについて次のような評価を得た。

- 機能分解木を用いて、自分の持っている材料の機能や製造プロセスに関する知識を網羅性、一覧性を持って記述することができ、雑然としていた知識を整理することができた。
- ある機能(製造プロセス)を達成する方式について、自分の専門分野だけでなく、少し離れた他分野の方式を比較して考えることが可能となり、今まで以上に発想の幅を広げることができた。
- この記述枠組みを用いることで、異分野の知識を理解することが容易になり、分野を越えた新材料の開発に役に立つであろう。

このように、人間の思考を外化することにより、設計者の発想に貢献することが確認でき、本システムが実現された際の有用性が専門家により示唆された。

今後の課題として、機能分解木から示される方式が適用可能な材料の性質に関する条件と、実際の材料データベースとの接続する枠組みの導入や、記述システムを機能概念オントロジーと連携させるための枠組みの導入、記述された機能分解木や製造プロセス木を方式ごとに分解する方式エディタの開発が挙げられる。また、材料データベースとの接続に関連して、材料の構造についての考察も行う必要がある。

4. まとめ

本稿では材料の「機能」や「製造プロセス」に関する知識を統合的に記述する「機能・製造プロセス知識統合的記述システム」を開発した。また、記述システムの利用法として、「材料設計支援システム」の概要について述べた。今後、3.3 節で述べた課題について考察し、本システムの実現を目指す。

参考文献

- [NMC04] 「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
- [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
- [垂見 04] 垂見,古崎,來村,渡邊,溝口,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,第18回人工知能学会全国大会,1G3-02
- [垂見 05] 垂見,古崎,來村,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.
- [辻野 04] 辻野貴志,ナノエレクトロニクス.jp, <http://www.nanoelectronics.jp/>
- [Kanki 03] T. Kanki, Y.-G. Park, Hide. Tanaka, and T. Kawai, Electrical-field control of metal-insulator transition at room temperature in $\text{Pb}(\text{Zr}_{0.2}\text{Ti}_{0.8})\text{O}_3/\text{La}_{1-x}\text{Ba}_x\text{MnO}_3$ field-effect transistor, Appl. Phys. Lett **83** (2003) 4860-4862