

# ナノテク材料設計支援のための材料種選択支援の枠組みの開発

## Development of a Supporting Framework of Choice of Kinds of Material for Supporting Design of Nano-Materials

垂見 晋也      古崎 晃司      來村 徳信      田中 秀和      溝口 理一郎  
 Shinya TARUMI,      Kouji KOZAKI,      Yoshinobu KITAMURA,      Hidekazu TANAKA,      Riichiro Mizoguchi

大阪大学産業科学研究所  
 Institute of Scientific 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 the same time. It would be very helpful for them to support their design process by a computer system. In this article, we discuss a conceptual design supporting system for nano-material. Firstly, we investigate the specifications of such a supporting system. And, we outline functionality of the system with some real examples.

### 1. はじめに

材料系分野の研究開発においては「(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係している。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。このような材料の機能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。

筆者らはこれまで材料の機能構造と製造プロセスに関する知識を統合的に記述する枠組みと、これらの概念設計を支援するシステムの開発を行ってきた[垂見 06]。筆者らが開発したシステムは材料の機能構造や製造プロセスの概念設計を支援するための機能を有している。

本論文では材料開発の重要な要素の1つである材料種選択を、本システムで支援するための枠組みの開発を試みると共に、材料の機能と製造プロセスの設計を統合的に支援するために必要となる課題について検討を行う。

### 2. 機能・製造プロセス知識統合的記述枠組み

材料の機能や製造プロセスの概念設計支援を行うためには、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]。これにより、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。

### 3. 材料設計支援システム

ここでは筆者らが開発を進めている材料設計支援システムについて述べる。

#### 3.1 システム構成

本システムは、「機能・製造プロセス知識統合的記述システム[垂見 05] (以降、記述システムと呼ぶ)」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、本記述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、材料の機能や製造プロセスの設計を行う。この際、本システムでは方式検索画面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。本記述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

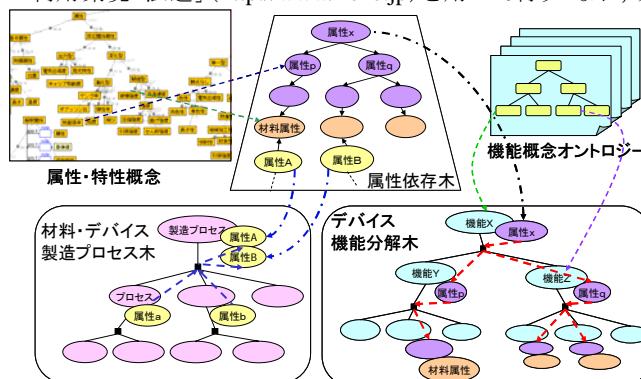


図1 機能・製造プロセス知識統合的記述枠組み

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

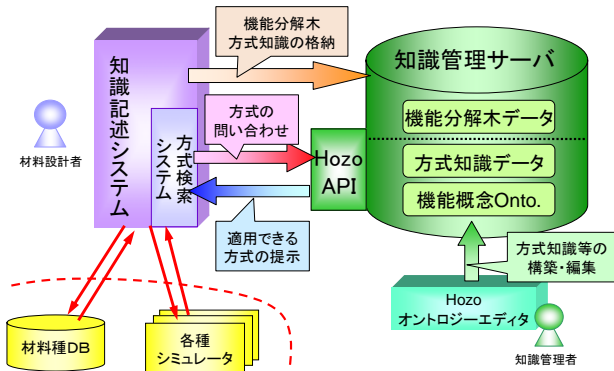


図2 材料設計支援システムのシステム構成

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。

### 3.2 材料設計支援機能

本システムにおける概念設計とは、材料の機能構造や製造プロセスを前節で述べた枠組みに沿って構築することである[垂見 06]。材料設計者はある機能を達成する方式を、方式検索画面を用いて検索し、システムは知識管理サーバに蓄積された方式知識の中から適用可能な方式を設計者に提示する。設計者は提示された方式を機能分解木に追加する、ということを繰り返すことで設計行為を進めていく。

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。

#### (1) 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3のように、「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。

#### (2) 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、スピン間距離制御方式は「制御しやすさ:低い」ということが、キャリア濃度制御方式では「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(図3の①の部分)。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

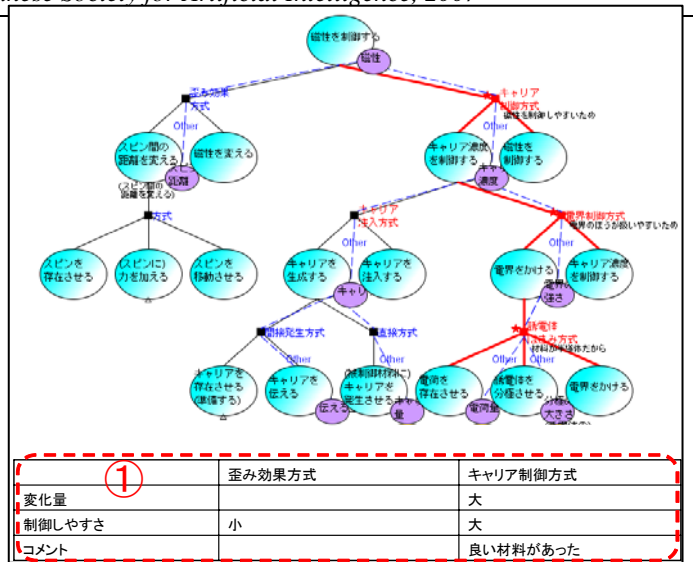


図3 属性間の依存関係と方式情報

いという点から、「キャリア濃度制御方式」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。

#### (3) 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。

本システムではこれらの機能を用いて材料の機能構造や製造プロセスの概念設計支援を行う。また、本記述システムを用いて実際の材料設計事例の追試的記述を行い、本システムが提供する知識記述機能が、実際の材料設計結果を記述する際に必要な記述能力を有するか、またその有効性の検証を行った[垂見 05]。

### 4. 材料種選択支援の枠組み

これまで筆者らは材料の機能構造や製造プロセスの概念設計を支援するために必要な知識記述枠組みと設計支援システムの開発を進めてきた。これは材料系の専門家が材料開発の際に、材料の機能と製造プロセスを統合的に検討している点に着目してきたためである。その機能を達成するのに用いられる材料は、製造プロセスの結果として製造される。よって材料は機能と製造プロセスを繋ぐ部分に位置づけられ、材料種選択は材料開発において重要な検討項目となる。ここでは、本設計支援システムで材料種選択支援のための枠組みについて検討する。

#### 4.1 機能を達成するための材料に関する知識

本システムにおける機能構造の概念設計では、どこまで詳細に機能分解を進めるのかは設計者の判断に委ねられている。しかし、筆者らが専門家と共に進めてきた材料の機能や製造プロセスの設計過程のモデル化では、ある程度まで機能分解を行

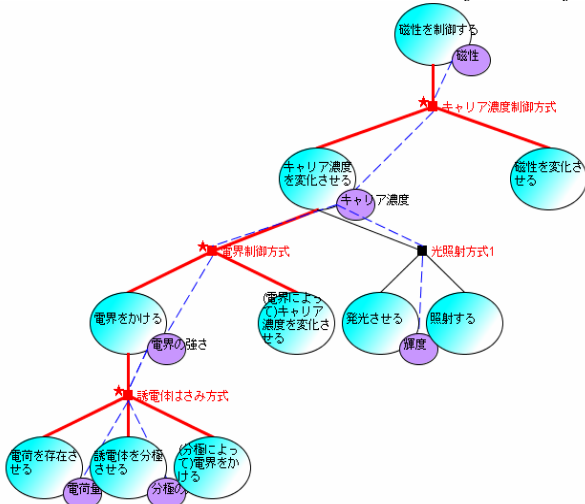


図4 磁性体材料の機能分解木

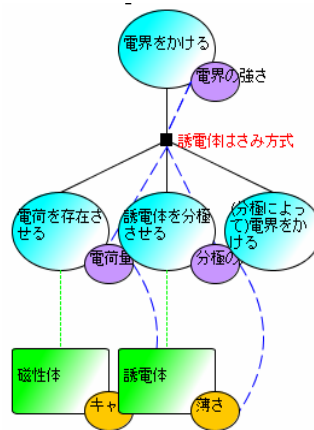


図5 材料ノードを追加した方式

った段階で、各機能を達成するために用いる材料種を決定し続いてその材料を製造するプロセスの設計に移行していた。例えば、図4の機能分解木の最下層の方式である「誘電体はさみ方式」において、実際の材料の機能・製造プロセス設計事例では「電荷を存在させる」という部分機能を達成するために用いる材料の種類を選択し、それ以降はそこで用いる材料を製造するための製造プロセスの概念設計に移っていた。そこで、本研究ではこのような材料選択の結果を方式知識に追加して記述するための枠組みを導入する。

図5は本枠組みを用いて、図4の機能分解木の最下層の方式である「誘電体はさみ方式」の部分機能「電荷を存在させる」や「誘電体を分極させる」に、それを達成するための材料を記述した例を示す。各機能を達成する材料は、それぞれの機能(を表す)ノードの下につながる四角のノード(材料ノード)で表す。それぞれの材料ノードには、その方式で適用できる一般的な材料の種類(以降、材料種と呼ぶ)を記述する。また、材料ノードにはその材料の属性と、それが達成している機能の属性と依存関係も記述する。図5の例では、「電荷を存在させる」という機能の電荷量が磁性体のキャリア量に依存していることが表されている。このように、機能達成に必要な材料を、方式知識に追加して記述することで、機能構造と材料の関係を設計者に提示できるようになる。

#### 4.2 材料種を具体化した方式

「誘電体はさみ方式」の部分機能「電荷を存在させる」を達成するためによく用いられる材料種として、鉄系材料やマンガン系

材料が知られている。これらの材料種を用いて機能を達成する材料を具体化した方式は、「鉄・誘電体はさみ方式」や「マンガン・誘電体はさみ方式」といった誘電体はさみ方式の下位方式として定義できる(図6・①)。このような部分機能を達成するために用いられる材料種を特定し具体化した方式を「材料種具体化方式(以降、具体化方式と呼ぶ)」と呼ぶ。それに対して、誘電体はさみ方式のように材料種は特定していないが、機能を達成するために必要な材料が記述されている方式を「材料種一般方式」と呼ぶ。本記述枠組みでは、具体化方式がどの材料種一般方式の材料種を具体化したのかを明示するために、図6・②のよう

に材料種一般方式を左にそして(右向きの)矢印をはさんで左側にその具体化方式を記述する。

材料種具体化方式の方式情報にその材料種を用いたときの特徴を記述することで、材料種の違いによる特性の違いを明示することができる。これらの情報は、本設計支援システムにおいては、方式検索画面やメイン画面を用いて従来の方式知識と同様に設計者に提示する。

#### 4.3 材料種選択支援の方法

ここでは、前節で導入した枠組みを用いてどのように材料種選択を支援するかについて述べる。

##### (1) 材料種一般方式を用いて材料種選択を行う場合

抽象方式で材料種選択を行う場合には、方式情報にその方式で適用できる材料種の条件を記述しておき、そこに記述された条件を基にして外部の材料データベースから適用可能な材料種を検索し設計者に提示する。設計者は提示された材料種の中から設計している機能構造や対象となる材料の条件等を考慮に入れて、採用する材料種を決定する。例えば、図4は磁性体材料の機能を表した機能分解木であるが、最下層方式である「誘電体はさみ方式」で磁性体材料として用いられる材料では、「磁石にならないといけない」、「キャリアを持つ」、「スピンを持つ」というような条件がこの方式の方式情報として記述される。選択された材料の組み合わせが、よく用いられると思われる場合は、材料種具体化方式として方式データベースに追加

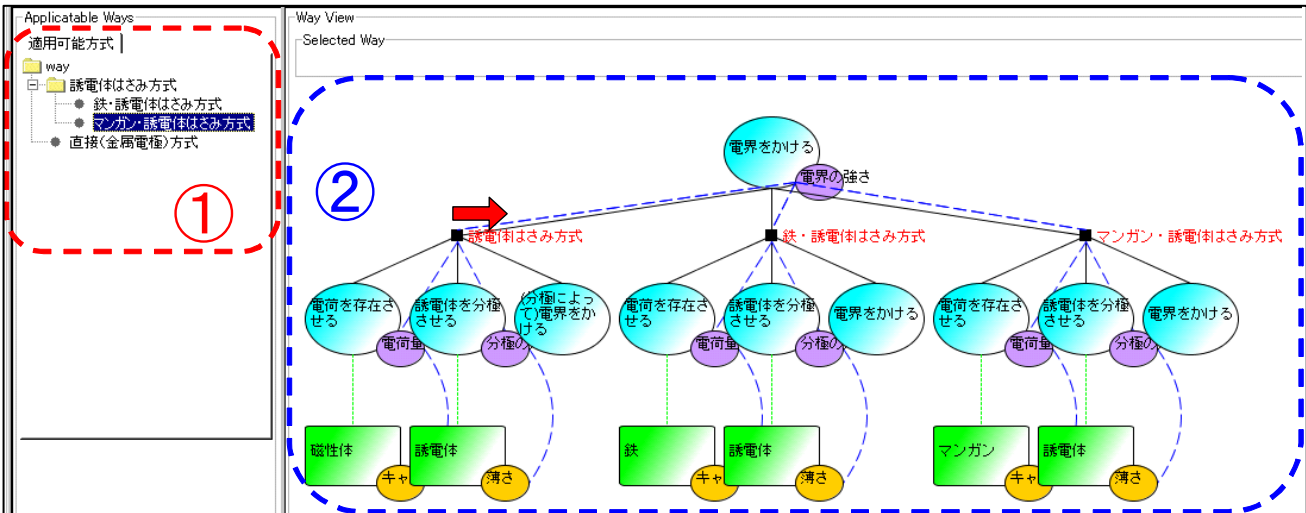


図6 材料一般方式と材料種具体化方式



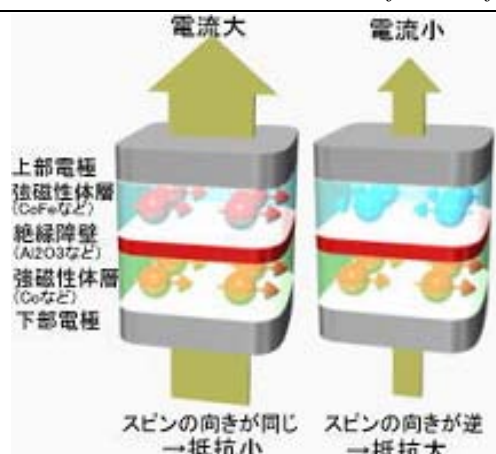


図7 磁性体を誘電体電極ではさんだ構造

することができる。

## (2) 材料種具体化方式を採用する場合

材料種具体化方式にはその方式情報にその材料種を用いた場合の特徴が記述されているので、設計者は提示された方式情報を基に、採用する材料種を決定する。

## (3) 製造プロセスとの関連付け

本設計支援システムでは、機能達成に用いられる材料種が決定されると、目的としている材料を製造するための製造プロセスの設計を行う。その時、採用した材料種によっては固有の製造プロセスを用いなければならない場合が考えられる。このような材料種と製造プロセスとの繋がりに関する知識も、抽象方式や材料種具体化方式の方式情報として記述し、設計者に提示すべきではあるが、この問題は今後の課題として検討を進めていく。

## 5. 今後の課題

### 5.1 材料構造と機能・製造プロセスとの関連

#### (1) 構造の方式化

材料系分野において、材料の構造がある機能を達成するために必要となっている場合がある。例えば、「誘電体はさみ方式」は「電界をかける」という機能を達成する方式であるが、これは図7のように誘電体に磁性体材料をはさみ、誘電体を分極させることで磁性体材料に電界をかける方式である。このように誘電体はさみ方式では、誘電体に磁性体材料を「はさむ」という構造自体が機能達成に必要となり、材料構造がこの方式の本質であることが分かる。このような材料の構造についても機能やプロセスと同様に方式知識として記述することで、一貫した扱いが可能となる。

今後はこのような材料構造と機能達成の関連について、専門家とのインタビューや実例を通して検証を進め、概念化できるように検討していく。

#### (2) 製造プロセスと材料構造から機能へのつながり

材料系分野の研究開発では、開発している材料で用いられる製造プロセスを改善した結果、開発した材料の構造が従来のものと異なることが発見され、その結果、開発した材料が新たな機能を発揮することが確認される、ということがよく報告されている。例えば、ナノ粒子の合成法として「Wポート法」というがあり、2種類の金属材料を加熱して蒸発させて合成させることで、特殊な構造のナノ粒子を得るための方法がある。そして、この特殊な構造によって機能が発揮されている。これは「製造プロセス→

材料構造→機能」という、本設計支援システムとは逆向きの材料開発過程と言える。

また、前項で述べたように、材料の機能とその構造との繋がり、何らかの関連があることは分かっているが、それを設計支援に用いることができるほど確立された物ではない。そこで、このような「製造プロセス→材料構造→機能」という繋がりに関する知識の中から、「機能→材料構造」の設計支援を行うための知識の抽出・体系化について検討していく。

## 5.2 その他の課題

材料系分野では、方式や材料の組合せを試行錯誤して新規材料の可能性を探ることがよく行われている。ここで材料設計者が新たに思いついた材料や方式の組合せが、過去の事例として存在しているのか、または、他の領域で違った方法で用いられている、というような情報を提示できれば、新規材料の開発に貢献できると考えられる。このような方式や材料の組合せに関する情報を検索し、それらに関する情報を提示する枠組みについても検討を進めていく。

また、材料の is-a 階層は、注目する属性(本質属性)を変えることで、材料の一般-特殊関係が逆転するということが起こる。これは is-a 階層が本質属性の値に注目して構築されているためである。例えば、従来の材料の is-a 階層を磁性体や誘電体という観点で見たときに、is-a 階層が異なるということが起こる。このように材料系分野では材料の注目する属性が目的機能によって変化することがあるので、設計者の観点(注目する属性)によって材料種の is-a 階層を動的に表示させる必要がある。

## 6. まとめ

本論文では、材料開発の重要な要素の1つである材料種選択を支援するための枠組みについて検討した。今後はこの枠組みを筆者らが開発を進めている材料設計支援システムに実装し、機能拡張を進める。また、5章で述べた課題についても、本設計支援システムへ導入するために検討、開発を進めていく。

## 参考文献

- [垂見 06] 垂見, 古崎, 来村, 溝口, 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, 第20回人工知能学会全国大会, 3B4-3, 2006
- [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, 2004
- [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 05] 垂見, 古崎, 来村, 田中, 川合, 中山, 新原, 溝口, 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, 第19回人工知能学会全国大会, 3C1-04, 2005
- [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