

## 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

垂見 晋也<sup>†</sup> 古崎 晃司<sup>†</sup> 来村 徳信<sup>†</sup> 田中 秀和<sup>‡</sup> 川合 知二<sup>‡</sup>

中山 忠親<sup>‡</sup> 新原 皓一<sup>‡</sup> 溝口 理一郎<sup>†</sup>

<sup>† ‡</sup> 大阪大学産業科学研究所 〒567-0047 大阪府茨木市美穂が丘 8-1

E-mail: <sup>†</sup> {tarumi,kozaki,kita,miz}@ei.sanken.osaka-u.ac.jp, <sup>‡</sup> {h-tanaka, nky15}@sanken.osaka-u.ac.jp

あらまし ナノテク材料の研究分野において、材料の「機能」－「構造」－「製造プロセス」の依存関係を明らかにすることが重要とされている。本研究では筆者らが開発した機能的知識共有枠組みを拡張することで、「機能」と「製造プロセス」の依存関係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」とそれに基づく「機能・製造プロセス知識統合的記述システム」の開発を行う。また、実際の材料設計の具体事例を追試的に記述することで、その有用性を検討する。

キーワード ナノテク材料, 機能, 製造プロセス, 知識記述, オントロジー工学

## Development of Editing System for Function-Manufacturing Process Integrated Knowledge of Nano-Material base on Ontological Engineering

Shinya TARUMI<sup>†</sup> Kouji KOZAKI<sup>†</sup> Yoshinobu Kitamura<sup>†</sup> Hidekazu TANAKA<sup>‡</sup> Tomoji KAWAI<sup>‡</sup>  
Tadachika NAKAYAMA<sup>‡</sup> Kouichi NIIHARA<sup>‡</sup> and Riichirou MIZOGUCHI<sup>†</sup>

<sup>† ‡</sup> The Institute of Scientific and Industrial Research (ISIR), Osaka University

8-1 Mihogaoka, Ibaraki, Osaka 567-0047 Japan

E-mail: <sup>†</sup> {tarumi,kozaki,kita,miz}@ei.sanken.osaka-u.ac.jp, <sup>‡</sup> {h-tanaka, nky15}@sanken.osaka-u.ac.jp

**Abstract:** 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 study, 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 effects and problems of the framework and the system through some real examples.

**Keyword:** Nano-Material, Function, Manufacturing Process, Knowledge Description, Ontological Engineering

### 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].

このような背景の下、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に開発した枠組みを[来村 02, 03].

材料の製造プロセス知識の体系的記述に適用した[垂見 03]. 本稿では材料の機能・製造プロセスの属性とその依存関係に着目し、従来の枠組みを、材料の「機能」と「プロセス」に関する知識を統合的に記述する枠組みに拡張する。さらに、その枠組みに基づく機能・製造プロセス知識統合的記述システムを開発し、実際の材料設計の具体事例を追試的に記述することで、その有用性を検討する。

### 2. 機能・製造プロセス知識統合的記述枠組み

#### 2.1. 機能的知識共有枠組み

本枠組みでは人工物の機能的知識を概念レベルで体系化する為に、機能構造と機能達成関係を、「方式概念」を用いた機能分解木で記述する。

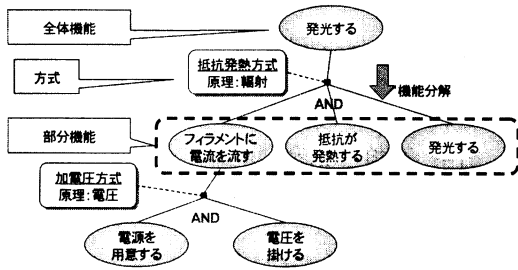


図2 機能分解木

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き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。

たとえば、白熱電灯が「発光する」という機能を達成するには「フィラメントに電流を流し」、それによって「抵抗が発熱し」、「発光する」。これは輻射という原理を利用した「抵抗発熱方式」を用いて図2のような機能分解木で表すことができる。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、蛍光灯で用いられている「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 木として記述する。この方式候補の OR 木をどのように選択したかには、設計者の思考過程や設計意図が現れ、4章で述べる設計支援に用いることができる。

## 2.2. 機能属性と属性間の依存関係

ここでは、材料系分野において属性や特性が重要な意味を持つことから、従来の枠組みにも属性の概念を拡張する。

### 2.2.1. 機能属性

先の例で述べた「発光させる」という機能において、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る。ここで、「光」は光を出すという機能達成の出力物であるので、「輝度」や「波長」は機能達成の結果の属性と考えられる。このように機能達成によってできる出力物に関する属性を結果属性と呼ぶ。一方、発光するときの「(発光) 効率」は出力物である光の性質を直接表す属性ではなく、機能

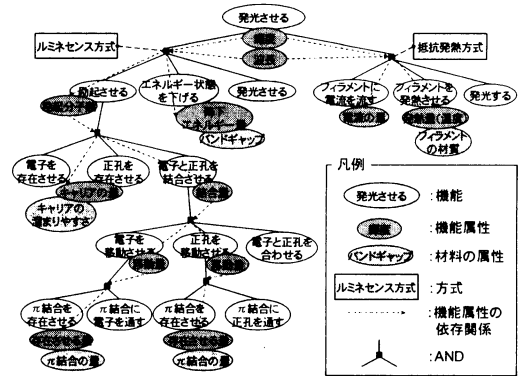


図3 「発光させる」の機能分解木

の達成中の属性と考えることができる。このように機能の達成中に関する属性を、機能の達成過程を表す属性であることから、過程属性と呼ぶ。このように機能達成による出力物の属性（結果属性）や達成過程（過程属性）の属性という機能に関する属性を「機能属性」と呼ぶ。これらの機能属性は図2のように機能分解木中では機能ノードの下に楕円形ノードで表示される。

### 2.2.2. 属性間の依存関係

図3では「発光する」という機能を「ルミネセンス方式」と「抵抗発熱方式」によって分解した機能分解木である。ルミネセンス方式において、「発光させる」の機能属性「輝度」は部分機能の「励起させる」の機能属性「励起分子数」に依存し、「波長」は部分機能「エネルギー状態を下げる」の機能属性「降下エネルギー量」に依存していることが知られている。このように全体機能の機能属性と部分機能の機能属性の間には依存関係が存在する事が分かる。機能属性間の依存関係は機能分解木中では破線で表す(図2)。

機能分解木において部分機能をさらに機能分解することで複数の階層を持つので、それに伴い機能属性の依存関係も同様に複数の階層にまたがる。例えば、図2において「発光する」の機能属性「輝度」は部分機能「励起させる」の機能属性「励起分子数」に依存する。また、「励起分子数」は「励起させる」の部分機能「電子と正孔を結合する」の機能属性「結合量」に依存する。よって、「輝度」→「励起分子数」→「結合量」のように「結合量」が変化すると依存関係の伝搬により「輝度」に影響を及ぼすと考えられる。

また、「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つの方式があり、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。よって、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。

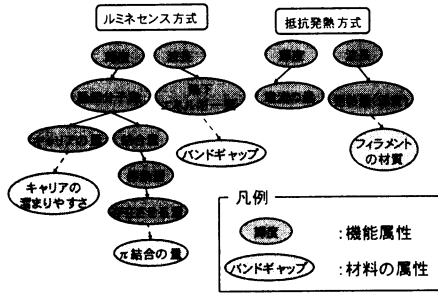


図4 属性依存木

### 2.2.3. 属性依存木

前節のように機能属性と属性の依存関係を従来の機能分解木に拡張することで、最上位機能の機能属性を変化させたい時に、どの部分機能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2で示した機能分解木の機能属性とその依存関係のみに注目し、機能属性や材料の属性とその依存関係を木構造で表現したものを「属性依存木」と呼ぶ(図3)。属性依存木を表すことで、属性間の依存関係の一覧性が高くなる。また、属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ために、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。

## 2.3. 製造プロセスへの適用と機能と製造プロセスの繋がり

### 2.3.1. 機能的知識共有枠組みの製造プロセスへの適用

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

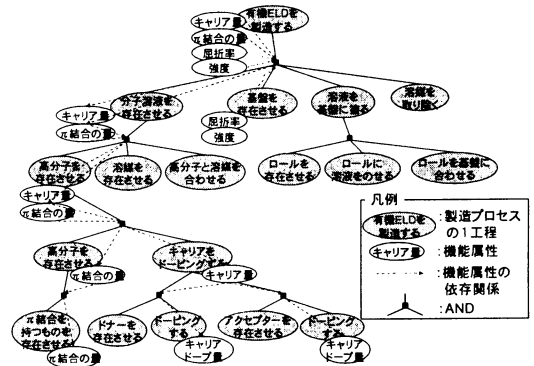


図5 有機ELディスプレイの製造プロセス木

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。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, 4)。

製造プロセスでも機能と同様に機能属性を考慮することができる。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表す。例えば、図5の「有機EDLを製造する」という製造プロセスの出力物は製造された有機ELDであり、その機能属性は有機ELDの性質を表している。

### 2.3.2. 機能と製造プロセスとの繋がり

図3の機能分解木において、「発光させる」という機能はディスプレイがシステム全体として発揮している。最も下層の機能は電子輸送層や発光層などの材料

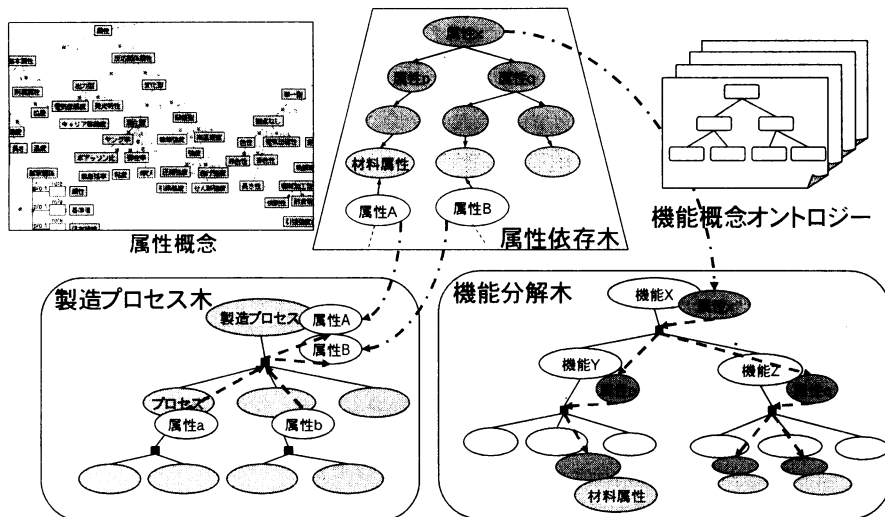


図6 機能・製造プロセス知識統合的記述枠組みの全体像

が直接發揮している。このように機能分解木において機能を發揮している主体を材料、部品、システムなどの区別をせず「装置」と呼ぶ。一方、図5の製造プロセス木はそれらの装置のうち、機能分解木における最下層の主体である「材料」を製造する工程を表している。この機能と製造プロセスの関係は材料だけではなく、一般の人工物においても同様に記述することができる。

機能分解木において、機能属性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ことで、知ることができる。つまり、材料の機能分解木と製造プロセス木との関係と、それぞれの木の属性間の一貫したフレームワーク連続性をもって記述することができる。

ここまでで述べた内容、材料の機能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の全体像は図6のようになる。これを「機能・製造プロセス知識統合的記述枠組み」と呼ぶ。

### 3. 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。本記述システムは機能分解木と製造プロセス木の間を管理し、統合的な知識を記述できる機能、拡張した機能分解木を記述する機能、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、表示する機能を有する。

本記述システムの画面構成は、機能属性と属性の依存関係を含む機能分解木を記述・編集するメインパネル、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間を表示する機能・製造プロセス統合パネルから成る(図7)。

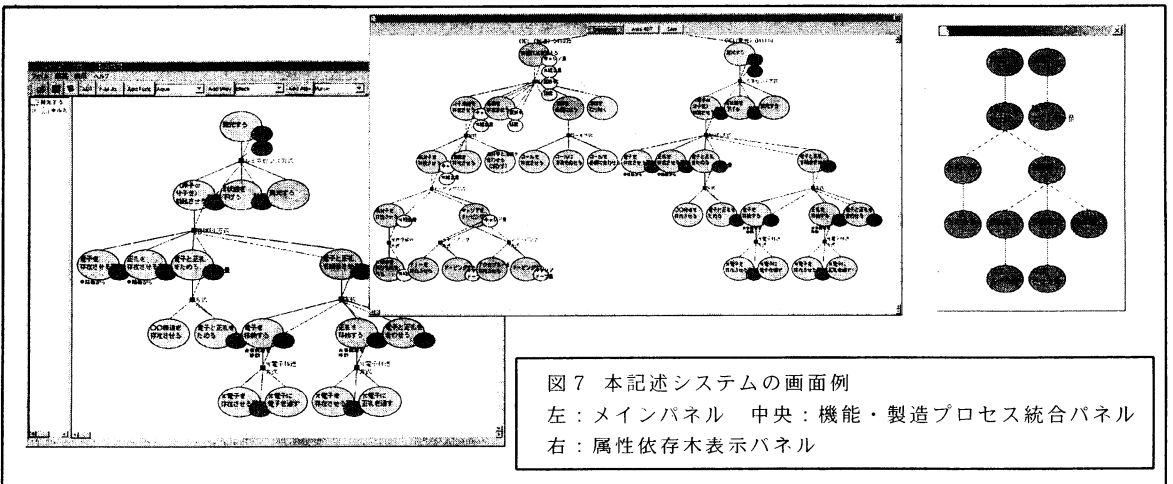
メインパネルでは機能分解木ノードとリンクを用いてグラフィカルに表示・編集する。機能分解木は、機能を表す機能ノードと、方式を表す方式リンク、機能属性を表す機能属性ノード、属性間の依存関係を表すリンクで表示される。属性依存木表示パネルではメインパネルで記述・編集された機能分解木の属性依存木を表示する。ここに表示される属性依存木は機能分解木から機能属性ノードと属性の依存関係のリンクを、システムが収集することで自動的に構築される。機能・製造プロセス統合パネルでは、機能分解木と製造プロセス木で記述された機能属性間の依存関係の表示・編集を行う。機能分解木と製造プロセス木の2つの木は左右に並んで表示され、属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(機能・製造プロセス統合プロジェクトファイルに保存される)。本システムによって記述された知識を材料設計支援システムに蓄積し、それらの知識を必要に応じて材料設計者に提示することで設計支援を行うことが可能となる。

### 4. 材料設計支援システム

#### 4.1. 材料設計支援システムの概要

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。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(以降、記述システムと呼ぶ)によって記述されたナノ材料に関する知識は本システムに格納される。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。

本研究では設計支援システムの開発に先立ち、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本記述システムを用いて記述した。さらに、実際の材料設計過程を追試的に記述することを通して、



記述枠組み及び、記述システムの有用性と、材料設計支援システムで想定される支援例を検討した。以下の節では具体事例を通して支援例について述べる。

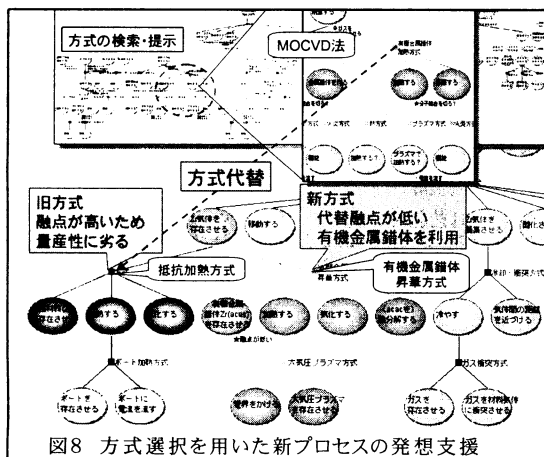
#### 4.2. 方式代替を用いた製造プロセスの改良発想支援例

機能分解木（製造プロセス木）において、ある機能（製造プロセス）を達成する方式は複数考えることができる。機能や製造プロセスの属性は、選択する方式によって異なるので、従来法において改善したい部分に関する方式を他の方式に代替することによって、より良い性質をもつ新しい機能やプロセスを実現することができる可能性がある。特に異分野で用いられている方式と代替することで、関連分野では気が付きにくい、新しい発想が生まれることが期待できる。

ここでは、ナノ粒子の合成プロセスの改善例の記述を通して、方式代替による発想支援を追試した。図8はあるナノ粒子（複合体）の製造プロセスの製造プロセス木の一部を示す。この製造プロセスにおいて、従来法では物理的気相合成法（PVD法）の考え方から、「Zr気体を存在させる」という製造プロセスを抵抗に電流を流し、抵抗が発熱することで金属 Zr を加熱し、蒸発させる「抵抗加熱方式」で行っていた。しかし、この方式では金属を気化させる為に高エネルギーが必要となり、大量生産には適していなかった。そこで「Zr気体を存在させる」を達成する方式を、化学的合成手法（MOCVD法）で用いられる「有機金属錯体昇華方式」に代替することで、大量の Zr 気体を得ることができるようになった。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思われる。

#### 4.3. 方式選択を用いた新規材料の設計支援例

材料設計は、目標とする材料機能をどのようにして実現するかという「①制御機構（方式）の選択」、「②その方式が適用できる材料の選択」、「③その材料を合



成する製造プロセスの選択」という過程を経て行われる。これらの過程における設計者の設計行為の一部は、機能分解木および製造プロセス木における方式選択の結果として表すことができる。よって、新たな材料設計を行う際に、システムが適用可能な方式を必要に応じて設計者に提示し、設計者の方式選択を支援することで、設計支援することができると思われる。

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を行った。

①制御機構の選択 ここで設計する材料が目標とするのは「磁性を制御する」という機能となる。そこで、「磁性を制御する」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9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。

②方式が適用できる材料の選択 方式選択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、その方式が適用できる材料の性質（属性）を調べることができる。ここでは「磁性を制御する」の機能属性「磁性」に注目し、依存関係を下位機能の機能属性へ辿っていくと「電荷を存在させる」の機能属性「電荷量」や「誘電体を分極させる」の機能属性「分極の大きさ」に依存していることが分かる。「電荷量」は機能の主体となる材料の属性「キャリア量」に依存し、「分極の大きさ」は誘電体の属性「薄さ」に依存しているので、「誘電体はさみ方式」に適用できる材料の「キャリア量」と「(誘電体の)薄さ」が重要であることが分かる。ここで具体的な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材料合成プロセスの選択 選択された材料を合成する製造プロセスの設計は、機能分解木と製造プロセス木のつながりを辿り、製造プロセスにおける方式選択を行うことで機能設計と同様の支援が行える。この例では「キャリア量」や「薄さ」に注目して製造プロセスの方式を選択した。

#### 4.4. 評価と今後の課題

4.2, 4.3節で示した具体事例の記述を通して、本記述システムを用いて、設計支援に必要な知識を記述することができることを確認した。しかし、4.3節で述

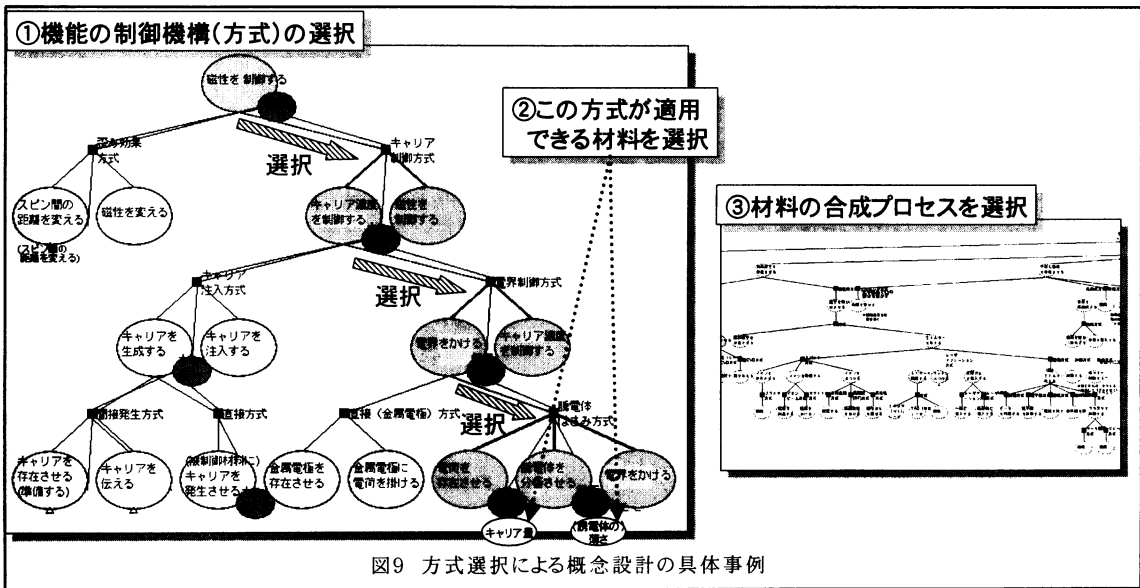


図9 方式選択による概念設計の具体事例

べた設計支援の過程において、具体的な材料種を決定する際には、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などを接続する枠組みの導入する必要があることが示唆された。この点は、設計支援システム実現に向けた今後の課題として、検討を行いたい。

また、これら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た。さらに、これらの知識を計算機に理解可能な形で格納することで、設計支援システムを開発することが可能になるということが、具体事例の追試を通して示唆された。

## 5. まとめ

本稿では材料の機能や製造プロセスの属性とその依存関係に着目し、従来の枠組み拡張して、材料の「機能」と「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枠組み」を

開発した。さらに、本枠組みに基づく「機能・製造プロセス知識統合的記述システム」を開発し、実際の材料設計の具体事例を追試的に記述することでその有用性を確認した。

今後、材料種の取扱いや機能概念オントロジーとの連携など、設計支援システムの実現に必要な記述システムの拡張を行うと共に、材料設計支援システムの詳細設計および開発を進める。その実現のためには、方式知識を体系的に格納する、方式知識サーバの開発などのより深い考察が必要であると考えている。

## 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
- [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  $Pb(Zr_{0.2}Ti_{0.8})O_3/La_{1-x}Ba_xMnO_3$  field-effect transistor, Appl. Phys. Lett 83 (2003) 4860-4862