

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

A First Step Towards Systemization of Functional Knowledge for Synthetic Process of Nanomaterials

垂見 晋也^{*1} 古崎 晃司^{*1} 来村 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

The research of nanotechnology is extended in various domains, and each domain intertwines with each other closely. If we can share such knowledge in different domains, it enables to facilitate research in each domain through cross fertilization. In this study, we aim to systematize the knowledge of process for synthesizing nanomaterials. In this paper, we build and refine function decomposition trees which express the synthetic processes with application of the framework of functional knowledge. In addition we discuss effects and problems of the framework into such processes.

1. はじめに

ナノテクノロジーに関する研究は多種多様な領域にまたがり、かつ、これらの領域は互いに密接に絡み合っている。このため、これらの知識を異なる領域間で共有することができれば、互いの研究領域のさらなる発展促進に貢献することが期待される。このような背景の下、NEDO による「材料技術の知識の構造化」プロジェクトが行われている[NEDO 02]。その一環として、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を目指している[溝口 02]。

本稿では、筆者らが開発を進めている人工物の機能的知識を表現する枠組み[来村 02,03]をナノテク材料合成プロセスの機能的知識に適用し、その効果とナノテク分野に適用する際の問題点を考察する。

2. 機能分解木による機能的知識体系化の枠組み

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、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。

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、

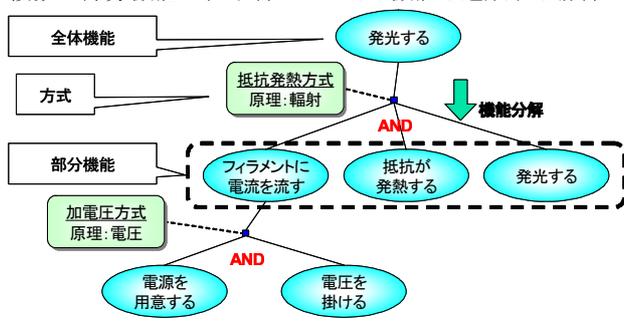


図1 機能分解木

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

必要な部分機能への枝をくり 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1のような機能分解木で表すことができる。

3. 機能分解木の記述と洗練

本研究ではナノテク材料合成プロセスに関する文献をもとに、機能分解木を作成することで機能的知識の体系化を試みた。文献から機能分解木を記述する手順は図2に示すように、

1. 文献から機能分解木の要素となる「機能」や「方式」を表していると考えられる部分を抽出する
2. 抽出した部分をもとに文献に記述されている言葉を用いて機能分解木を記述する
3. 記述した木を機能的知識共有枠組みの指針に基づき洗練する

である。

本研究では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情報源として、「カーボンナノチューブ複合成型体の製造方法の特許情報」と「ナノ粒子生成プロセスの解説文」などを用いた。本稿では一例として、特許情報を情報源とした機能分解木の記述について述べる。

3.1 機能分解木の要素の抽出と記述

まず、文献に記述されている内容を機能分解木の要素となる部分とそうでない部分に分ける。機能分解木の要素とは、2章で

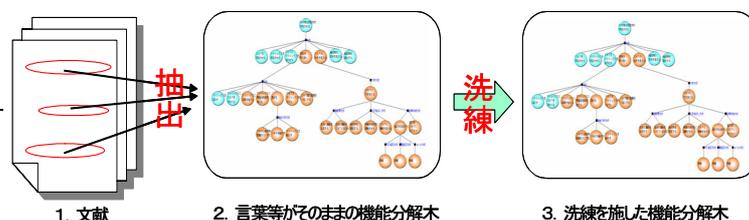


図2 機能分解木の記述の手順

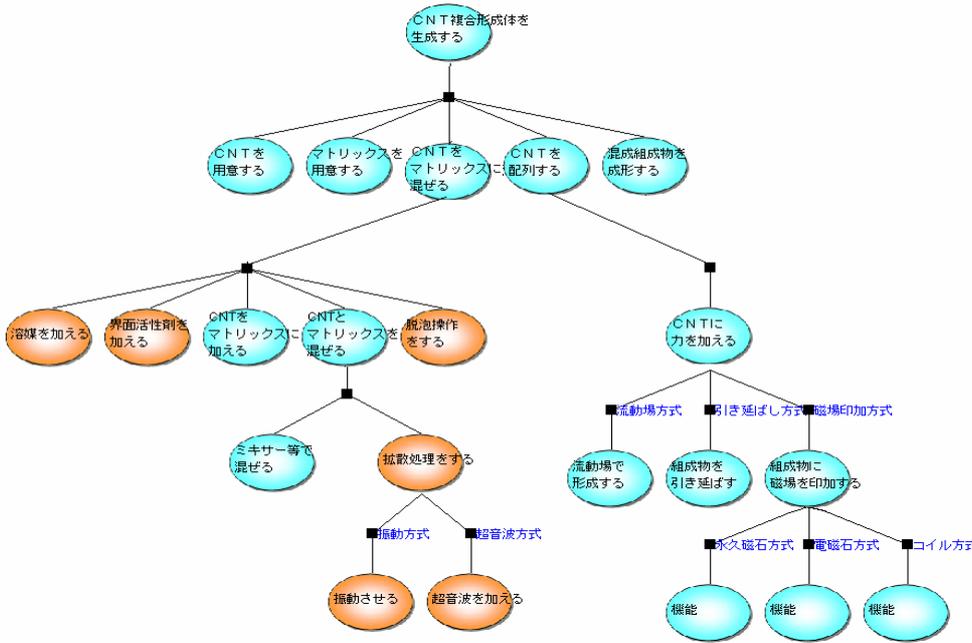


図3 洗練前の機能分解木 (一部)

述べた「機能」、「方式」などである。たとえば、以下のような特許文書[特開 02]に記載されている内容を例に考えてみる。

【0004】一方、マトリックス中にカーボンナノチューブを含む組成物を、**流動場やせん断場で成形**したり、**組成物を引き延ばす方法**等によって**カーボンナノチューブを流れ方向に配列させる**ことは可能である。ところが、**カーボンナノチューブを流動方向に配列させる方法**では、板状の成形体の厚み方向にカーボンナノチューブを配列させることは不可能であり、必ずしも任意の方向にカーボンナノチューブの配列を制御させることはできなかった。

この例では斜体で示した「**カーボンナノチューブを流れ方向に配列させる**」などは機能であると考えられ、ゴシック体で示した「**流動場やせん断場で成形**」、「**組成物を引き延ばす方法**」は配列させる方法について書かれているので、機能を達成するための方式を表すと考えられる。それ以外の部分は、機能や方式に関する説明や、具体事例など、機能分解木には直接現れない情報となる。なお、本枠組みは機能を定性的に観測するための記述方法なので、電気抵抗率などの具体的な数値は機能分解木には現れない。

このようにして、文献全体から機能分解木の構成要素となる部分を抽出した後、それらの結果を基にして機能分解木を記述した。(図3)

3.2 機能分解木の洗練

前節で記述した機能分解木は文献に記述されている語彙をそのまま抜き出して用いているので、機能的知識共有枠組みで推奨されている指針[高橋 02, 来村 03]に則していない箇所が多い。これらをその指針に基づかせることで機能分解木の洗練を行う。洗練を行うことにより機能分解木はより汎用性を高めることができ、次章で述べるような効果も期待される。ここで用いた

洗練の指針は次のようなものがある。

- 機能と方式の分離
- 機能と目的語の分離
- 機能の上位と下位で入出力の一致
- 補助機能の峻別
- 語彙の統一

これらの中からいくつか例を挙げて述べる。

(1) 機能と方式の分離

文献に記述されている語彙の中にはその機能を達成するための方式がその語の中に含まれているものがある。たとえば、「粉碎処理をする」が本質的に果たしているのはCNT(カーボンナノチューブ)とマトリックスが混ざりやすくなるためにCNTを「分割する」して小さくしているという機能であり、その際に用いている方式がここでは「圧縮力を用いる」という方式(圧縮力方式)である。よって、「粉碎処理をする」は方式を分離して、「力を加える」と「分割する」という部分機能に分解できる。(図4)このように機能と方式を分離することで「分割する」という機能を達成するための方式として「圧縮力方式」、「切る」という方式や「剥がす」という方式といった別の方式を利用することができる可能性があることが明示される。

同様に図5の例において「洗浄処理をする」が本質的に達成しているのは、CNTとマトリックスが混ざりやすくなるためにCNTに付着している汚れ(不要なもの)を除去するということである。ここで「洗浄処理」は「汚れを取り除く」ための1つの方式であり、「取り除く」という機能と「洗う」という方式(流体方式)を分離する。このように本質的な機能とそれを達成するための方式を分離することで機能を表す語彙(機能語彙と呼ぶ)の汎用性を高めることができ、機能語彙の数が膨大になること防ぐ。よって、本質的にやっていることのみを『機能』とし、それを達成するための『方式』を分離することが重要となる。

同様に図5の例において「洗浄処理をする」が本質的に達成しているのは、CNTとマトリックスが混ざりやすくなるためにCNTに付着している汚れ(不要なもの)を除去するということである。ここで「洗浄処理」は「汚れを取り除く」ための1つの方式であり、「取り除く」という機能と「洗う」という方式(流体方式)を分離する。このように本質的な機能とそれを達成するための方式を分離することで機能を表す語彙(機能語彙と呼ぶ)の汎用性を高めることができ、機能語彙の数が膨大になること防ぐ。よって、本質的にやっていることのみを『機能』とし、それを達成するための『方式』を分離することが重要となる。

(2) 機能と目的語の分離

文献に記述されている機能を表す語彙の中には、機能の対象をその中に含んでいるものがある。これらの語彙を全て機能語彙として表現すると、対象の数に応じて無数に機能語彙を定義する必要が生じる。また、動作の対象を含んでいるので、機能語彙の対象も限定されてしまうため「機能語彙」の汎用性に欠ける。よって、その語の中に含まれる機能と機能の対象を分離するべきである。

たとえば「脱脂処理をする」は「CNTに付着している脂」を取り除く機能を表しており、これは「取り除く」という機能の対象が「CNTに付着している脂」であると考えられる。よって、目的語である「脂」と機能である「取り除く」を分離して、「(脂を)取り除く」とすべきである。同様に「脱泡操作」はCNTとマトリックスを混ぜ

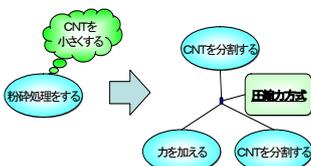


図4 粉碎処理をする

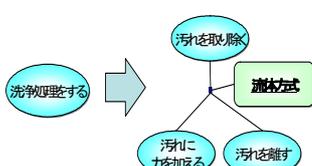


図5 洗浄処理をする

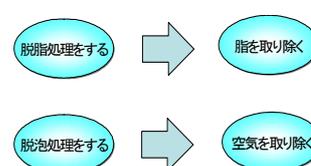


図6 目的語の分離

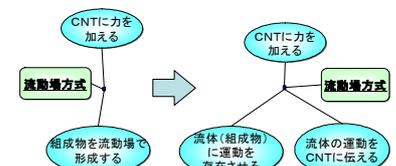


図7 入出力の一致

た際に「混入した空気」を取り除く機能を表しており、これは「取り除く」という機能の対象が「(混入した)空気」であると考えられる。よって、目的語である「空気」と機能である「取り除く」を分離して、「(空気を)取り除く」とすべきである。(図6)

このように、目的語を分離することで「脱～処理(操作)をする」という機能を表す語彙は「～を取り除く」という機能語彙において、対象となるものが異なるだけ、ということがわかる。また、「洗浄処理をする」は図5に示すように、対象となるものが「汚れ」であるだけで、同じ「取り除く」という機能であることが明らかになる。これらのことから、この指針にそって機能分解木を洗練することで共通性の理解に貢献できると考えられる。(詳しくは次章で述べる)

(3) 機能の上位と下位で入出力の一致

機能分解木では 全体機能と部分機能の集合の入出力は一致していなければならない。たとえば「CNTに力を加える」という全体機能に対して、流動場方式では「(組成物を)流動場で成形する」が部分機能となっている(図7参照)。ここで、「CNTに力を加える」における入力力はCNT+力であるのに対し、「流動場で成形する」における入力力は不明確である。これは「CNTに力を加える」という機能を達成するために『どのような方法で力を加えるか』ということに関して「流動場で成形する」という方法を記述しただけであり、CNTに力を加える機能を表したことはなっていないからである。そこで「流動場で成形する」をさらに詳しく考えると、「組成物(流体)をある方向に運動させ」、「その運動をCNTに伝える」ことで「CNTに力を加える」という機能を達成しているということがわかるので、このように部分機能に分解した(図7)。

洗練した機能分解木を図8に示す。

3.3 検討課題

本枠組みを適用する際に次のような問題点があった

1つめは副詞的な内容を含む機能で、たとえば「拡散処理をする」が本質的に果たしているのは、「広げる」という機能なので、本枠組みでは『一様に』という副詞を分離して「(CNTをマトリックス内に)広げる」と表す。しかし、ここで「拡散」とは「濃度分布の異なる混合物が平衡状態に近づくにつれてその濃度分布が一様になってゆく現象」という意味であり、「拡散処理をする」には『一様に』という意味が含まれていると考えられ、「広げる」では『一様に』という副詞によって表された情報が欠落していること

が分かる。そこでこのような副詞についての枠組みの拡張の検討が進められている。

なお、従来の枠組みをそのまま用いるなら、この例では、「CNTをマトリックス内に広げる」と「CNT間の距離を一定にする」という2つの機能が同時になされているとみなし、それを分割して記述することで情報の欠落を防ぐ方法が考えられる。

2つめは化学分野特有の機能語彙の検討で、たとえば「活性化処理をする」のようなものが挙げられる。このような、化学系分野特有の語彙は多数あるが、その中から何を機能語彙として導入するかについては吟味を重ねなければならない。

4. 機能分解木の効果

続いて上述のように、文献から記述した機能分解木に洗練を施すことによって行った、ナノテク材料合成プロセスに関する機能的知識の体系化によって得られる効果について検討する。

4.1 改良点の明示

機能分解木において、選択されている方式の組み合わせを比較することで、複数の事例間の相違点や過去の事例において「なぜ特定の方式を選択したのか」という改良の意図を理解することが可能となる。たとえば、図9ではマトリックス中の「CNTの向きを変える(配向する)」ために「CNTに力を加える」機能を達成する方式として、従来の「流動場方式」、「引き延ばし方式」では、その原理の性質から力を加える方向が運動の方向に制限され、組成物の厚み方向にCNTを配向できない。そこでこれらの代わりに「磁場印加方式」という磁力を加える方向を変えることで任意の方向にCNTを配向することのできる方式を選択した、という従来技術からの改良点が機能分解木に明示されている。ここで明示された改良点は、この例で情報源とした特許情報における主な請求事項と対応している。このように、特許情報の内容を機能分解木で表すことにより、その特許記載されている発明の新規性が一目瞭然な形で明示される(図9)。

このように、機能分解木で表すことにより他の方式との比較を瞬時に行うことができ、プロセス設計などの作業中に改良を提示するにはきわめて効果的であると考えられる。

4.2 共通性の理解

機能分解木を比較することで、文献で書かれている文章を見ただけでは全く違う方法として表されていた2つの方法の共通

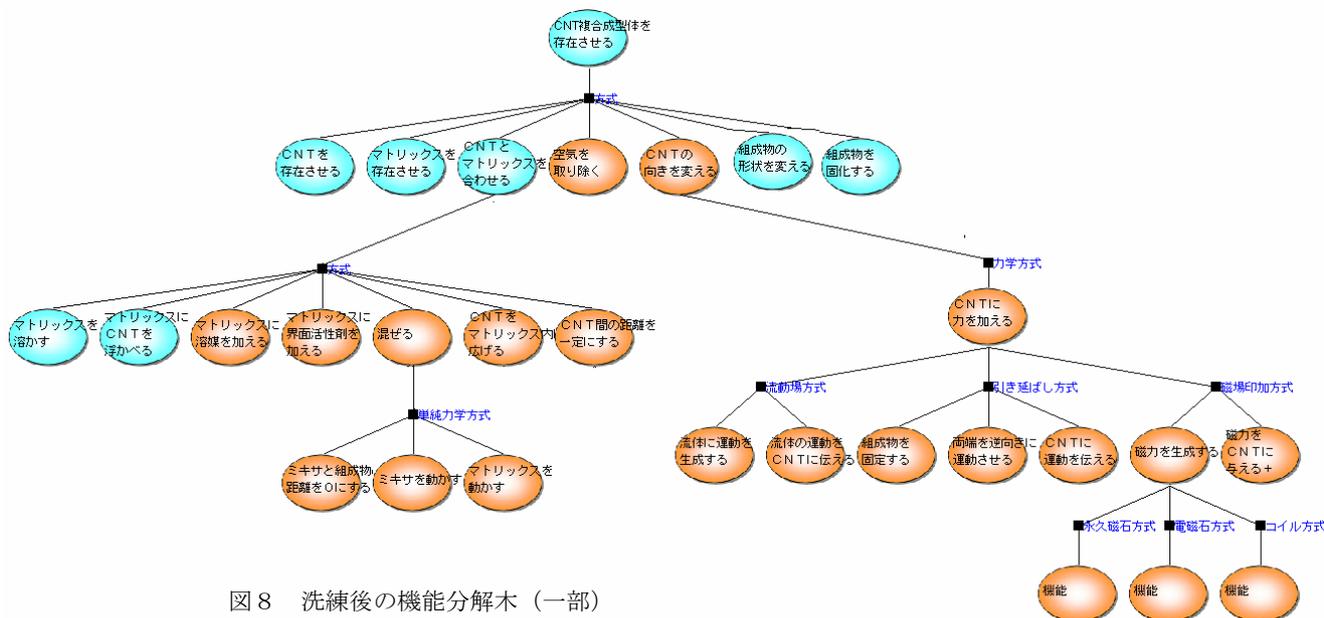


図8 洗練後の機能分解木 (一部)

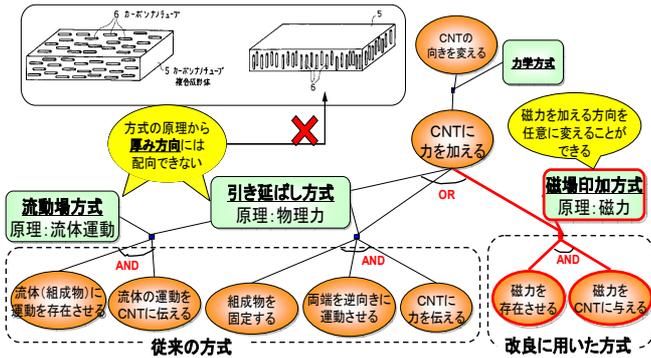


図9 CNTに力を加える方式の改良

点を発見することができる。たとえば、先の例において「CNTの向きを変える」ために「CNTに力を加える」という部分機能を用いているが、これを達成するため方式に「流動場方式」がある。これは「組成物(流体)に運動させ」てそれを「CNT(対象)に伝える」ことで、CNTに力を加える機能を達成している。一方、この「流動場方式」は領域の全く異なる洗濯機にも使われている。洗濯機では「汚れを離す」ために「汚れに力を加える」部分機能として用いており、「水(流体)を運動させ」てそれを「汚れ(対象)に伝える」ことで、「汚れに力を加える」機能を達成している。ここでCNTと汚れ、組成物と水を対応させると、この2つが原理的には同じ方式であることがわかる(図10)。このように一見かけ離れたプロセスにおいても、機能分解木を記述し、洗練することで共通点が見いだされる。

4.3 方式代替による発想支援

1つの機能を達成する方式は複数存在し、ある方式を新しい方式に代替することで新たな達成方法の発想がなされる。たとえば、図9の例では「力を加える」方式を従来の「流動場方式」や「引き延ばし方式」から「磁場印加方式」に代替したことで、特許として申請した発想がなされている。このとき、様々な方式を知識ベースに蓄えておき、必要に応じてユーザーに提示することで、発想支援を行うことが出来る。この際、機能や方式を領域に依存しない形で概念化することで、全く別の分野からでも共通と思われる機能を達成できる方式を提示し、設計者に新たな発想を支援することが期待できる。

そこで、筆者らは現在、このような方式代替による発想を支援システムの開発を進めている。このシステムは機能オントロジーに基づいて定義された機能概念と、各機能を達成する為の方式がデータベースとして整理されており、機能分解木を用いた機

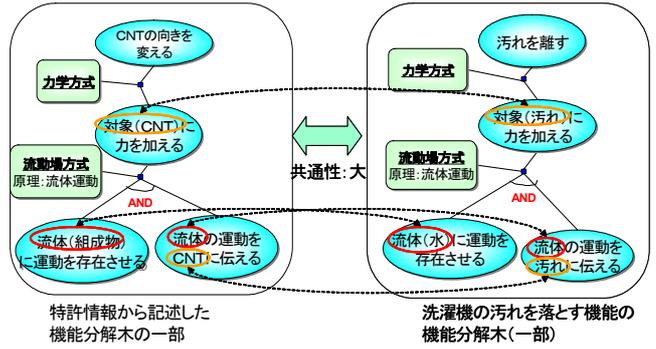


図10 洗濯機の「汚れを離す」機能との比較

能構造の概念設計や改良設計を支援する。ユーザーが全体機能を選択すると、別の画面にはあらかじめデータベースからその機能を達成するための方式が検索・表示される。設計者は表示された方式から適当な方式を選択することで、目標とする全体機能を達成するためのプロセスを設計することができる。この際、複数の方式を比較することで、従来手法からの差違を明示することもできる。また、各機能や方式に関する詳細な情報を得るために、外部のシステムやWebページと接続するインタフェースも組み込まれている。

5. まとめ

本論文ではナノテクノロジー材料合成プロセスに関する機能的モデルの記述を、これまでに開発が進められてきた機能的知識を表すための枠組みを用いて試みた。本枠組みは従来プラントや工業製品などの人工物の機能を対象として開発されたものであるが、ナノテクノロジー材料の合成プロセスにも十分に適用することが可能であることが確認できた。またその際、本枠組みが与える指針に基づいて機能分解木を洗練することの有用性について考察した。今後の課題としては、これまでは対象としていなかった材料合成プロセス分野固有の概念、たとえば「活性化する」など特に化学系分野に近い概念の体系化についてさらなる検討を進める。

参考文献

[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
 [来村 02] 来村徳信, 溝口理一郎, 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] 来村徳信, 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.
 [高橋 02] 高橋知伸, 吉川真理子, 笠井俊信, 来村徳信, 布施雅義, 溝口理一郎, 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
 [溝口 02] 溝口理一郎, 古崎晃司, 目崎令司, 他: プロジェクトの現状と縦プロジェクトとの連携紹介ナノテクノロジー・材料技術シンポジウム 材料技術の知識の構造化にむけて予稿集, 2002
 [特開 02] 日本国特許庁 カーボンナノチューブ複合成型体及びその製造方法 特開 2002-273741A
 [NEDO 02] NEDO 材料ナノテクノロジープログラム 最良技術の知識の構造化プロジェクト 報告書, 2002

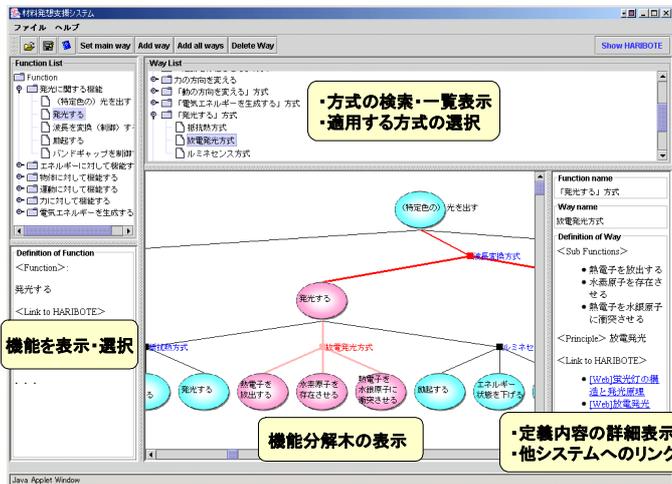


図11 発想支援システムの画面