

機器設計における材料選択のための ウェブ・オントロジー

芦野俊宏*, 芳須弘**

1. はじめに

WWW (World Wide Web) の普及によりインターネット上に存在する情報リソースを活用するための基盤が形成されたが、WWW は基本的に論文などのドキュメントをハイパーテキストとして共有するための仕組みであり、材料データを初めとするファクトデータを共有するためのプラットフォームとしては不適であった。XML (Extensible Markup Language) の開発により、タグの拡張によって任意の構造を持つデータを交換することが可能となり、商取引、電子カルテ、ゲノム情報など数多くの分野において情報を共有するための共通のデータスキーマが開発されている。

材料の分野においても、材料の物性データを記述するための標準スキーマとして MatML (Material Properties Markup Language) の開発が ASM を中心として継続されており、現在 Version 3.0

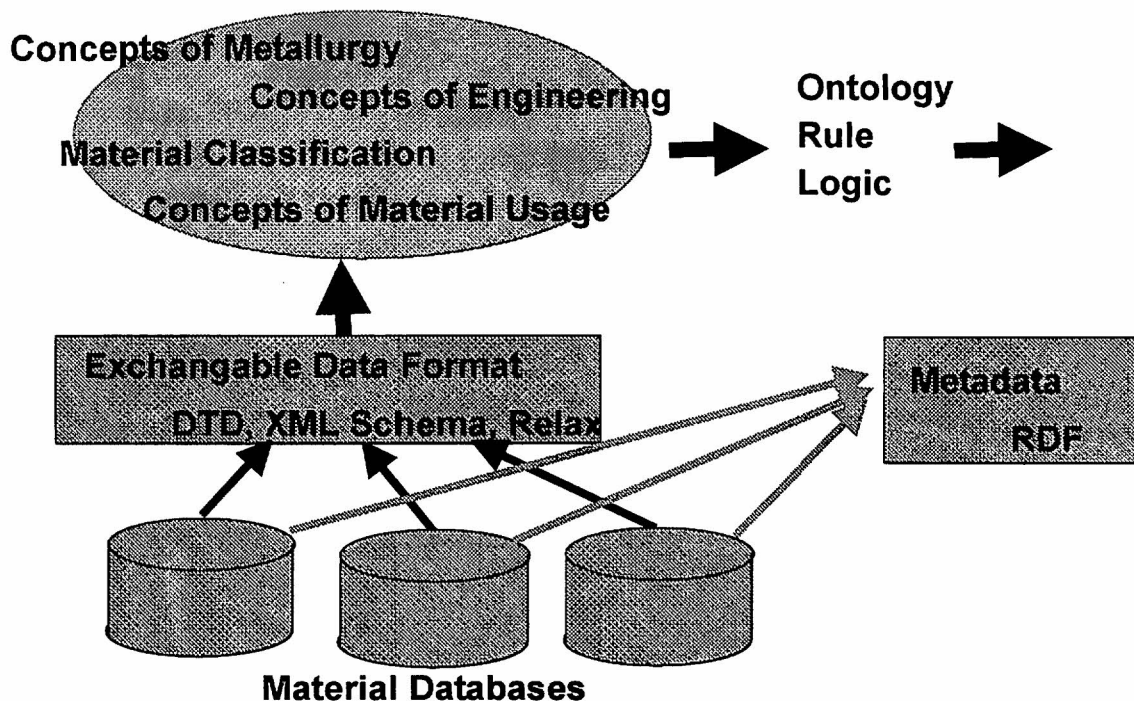


図1 XML を用いたデータと知識の共有

*東洋大学国際地域学部教授

**独立行政法人物産・材料研究機構

が公開されている¹⁾。2004年には NSF (National Science Foundation) の NSDL (National Scientific Digital Library) プロジェクトの一貫として Workshop for Scientific Markup Languages が開催され、材料科学、化学、地球科学、数学の四つの分野に関連する科学技術情報を相互に交換するためのマークアップ言語についての議論が行われ、科学技術分野における情報交換のための標準的な手段として XML によるマークアップ言語を用いるという考え方が一般的になりつつある²⁾。

データの共有に続いて、知識の共有を目的とする次世代の WWW 技術としてセマンティック・ウェブに関連した基盤技術の開発が進んでいる (図 1)。本稿では、その中の構成技術の一つであるオントロジーを用い、高温機器設計に必要なクリープデータの評価に関するオントロジーに関しての検討を加える。

2. オントロジー表現

オントロジーとは本来存在論の意であるが、知識工学的に用いた場合には複数の定義があり、専門家の間でも意見が分かれているのが現状である。しかしながら、概念構造を明確にするためのものであるということでは共通している。情報として表現する場合には、概念と関連する概念の間の関係、概念に関する説明、関連する属性と属性値の範囲を明確に指定した辞書の一種と考えられる。

材料の種類を例とすると、図 2 のように合金 (Alloy) はその特性によって耐熱合金 (Heat Resistant Alloy)、耐腐食合金 (Corrosion Resistant Alloy) などに分類され、また組成によって Ni 基合金 (Ni-Based Alloy)、ステンレス鋼 (Stainless Steel) などに分類される。これらの概念は互いにネットワーク構造を成しており、必ずしも階層構造で収まるものではない。

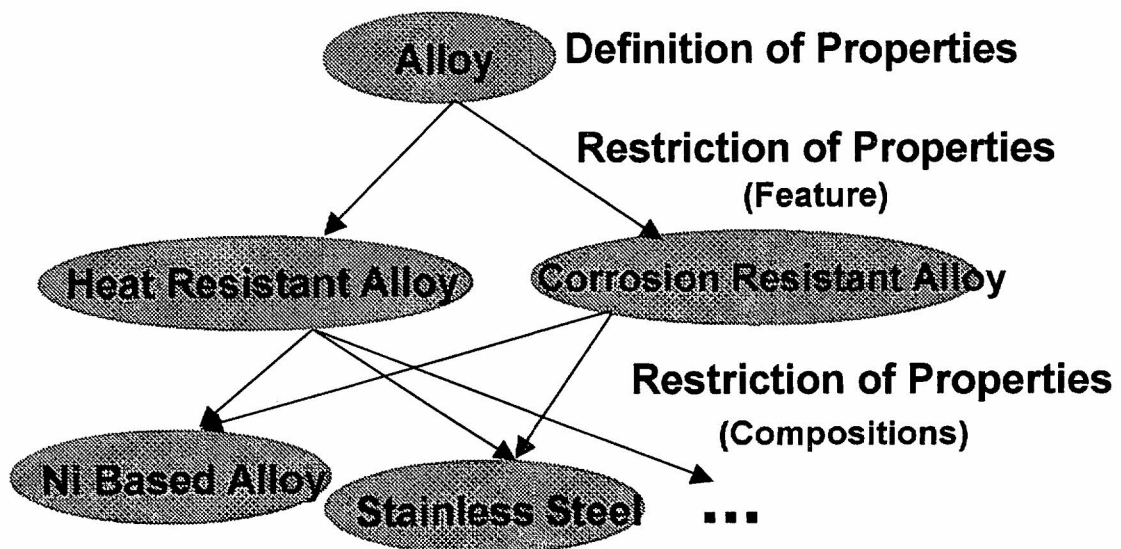


図 2 材料の特性による分類例

このような構造を表現するための記述言語として DAML (DARPA Agent Markup Language)、OIL (Ontology Interface Layer) などいくつかの形式が提案されたが、現在、これらを開発した経

- ・関連語の中には上位・下位の関係では表現しきれない多くの関係が含まれており、概念の属性、クラス-サブクラスの関係、同じ上位クラスを持つもの、材料の用途に関する記述など、内容を理解した上でオントロジーにおける関係にマッピングする必要がある。

4. クリープ特性に関するオントロジー

前述のシソーラスから得られたオントロジーを、実際の高温機器設計に用いられる手順を考慮して芳須らが拡張したものを図4に示す⁹⁾。この検討により、シソーラスでは、図の左上の部分、Conceptual Worldと分類された部分にある語彙、材料のTaxonomyに相当する部分に関しては十分な整備がされているが、右下の部分、Real Worldと分類された部分に関する語彙が不十分であることが明らかになった。

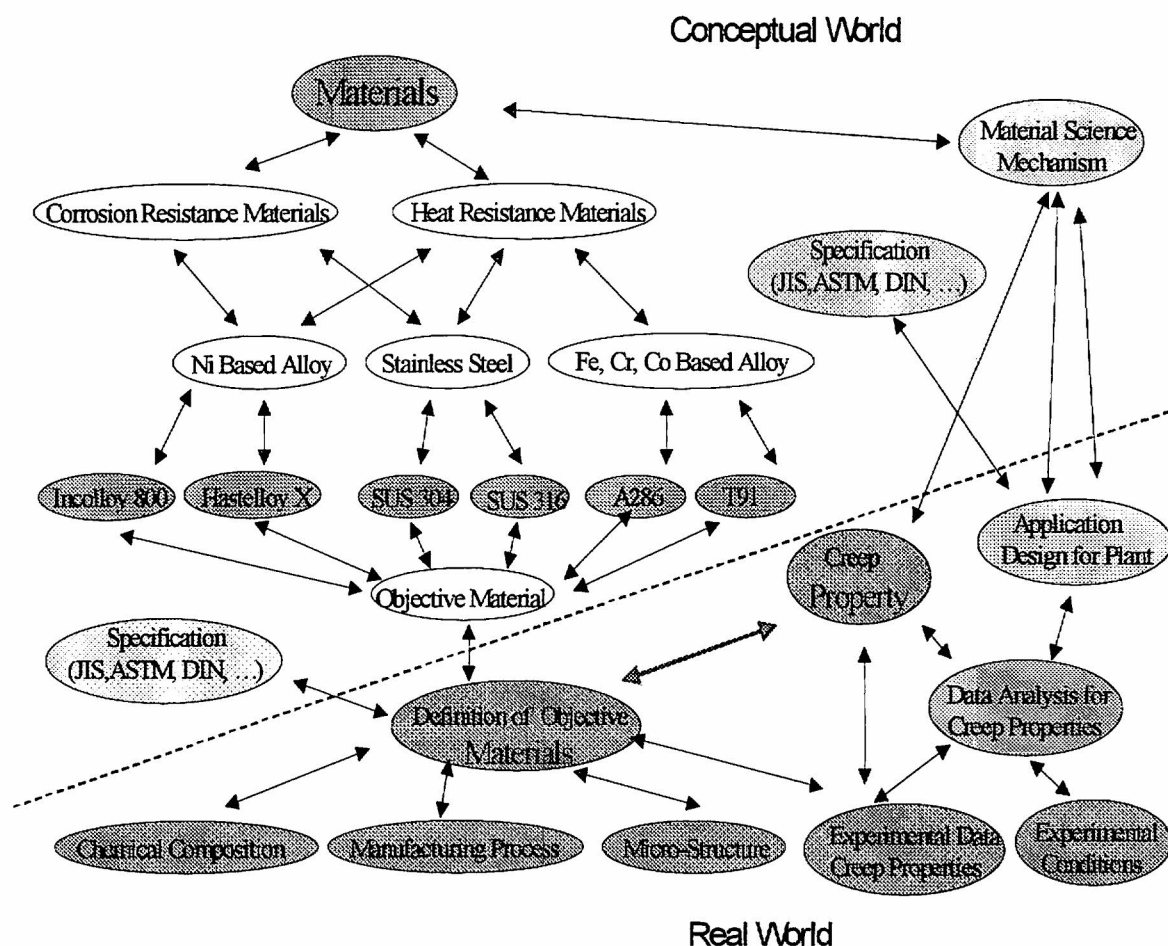


図4 クリープ特性に関連した語彙の関係

この領域に属する語彙は、主としてクリープ特性を実際に評価するための実験に関連する語彙、および得られたデータを評価して設計に必要とされる特性値を求めるためのデータ処理とその背景となる材料科学的な知見に関する語彙である。一般に、材料に関する実験データではパラメータ数が多く、データにばらつきがあるために、材料科学的な知見に基づいて設計変数を求め、機器設計

時の基準とする。このような手続きの記述に必要とされる語彙がシソーラスでは得られない。

5. 高温機器設計に用いられるオントロジー

機器設計のための標準規格などに基づいて、前節において述べたデータ処理の過程に関連する語彙の関係をさらに詳細に示したものが図5である。ここに含まれる語彙を実験データから適切な材料を選択するまでのデータの流れに基づいて、オントロジーに属する概念と、それに作用するルール、手続き、知識に分けて図6に示す。

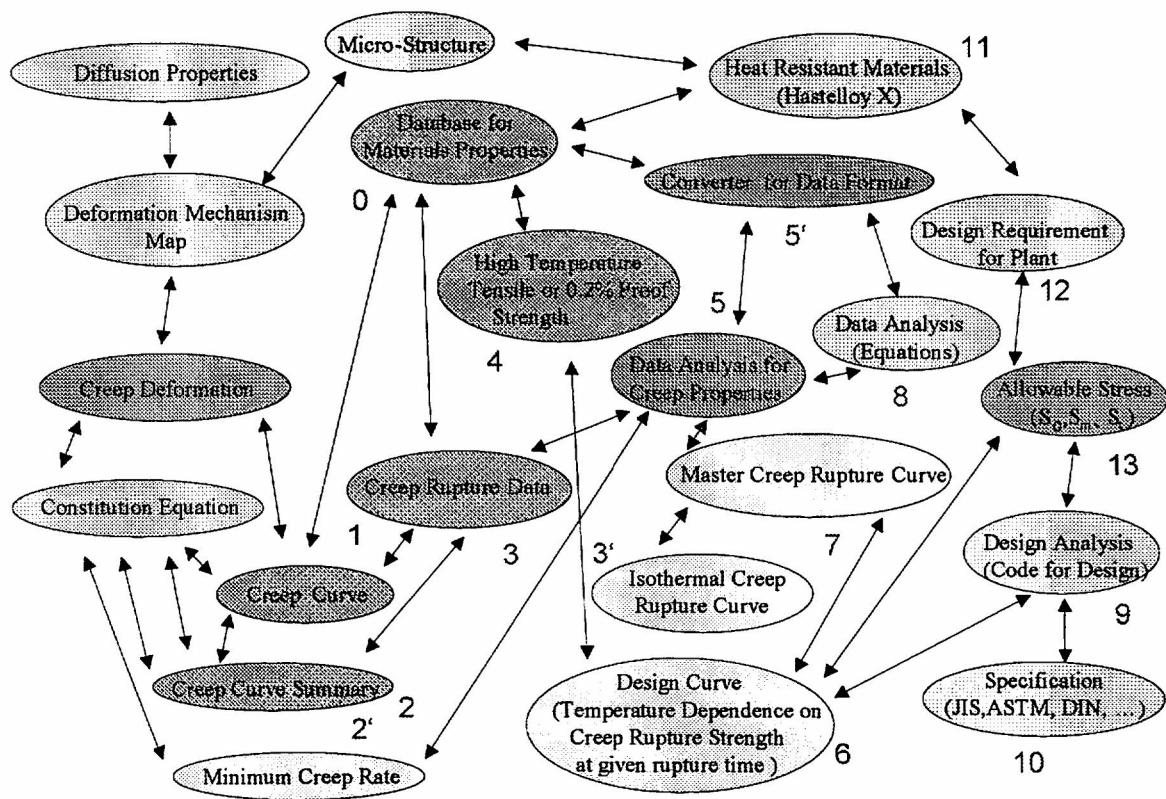


図5 高温機器設計の手順 (一部)

クリープ特性を測定する実験では特定の材料に関して、温度と時間を変化させてこれに加わる応力を測定し、このデータからある材料が特定の温度、応力下で何時間の使用に耐えるかを求める。このためには得られた実験データを特定のルールに従って曲線でフィッティングし、温度と時間という二つのパラメータを材料科学的な知見に基づいて一つにまとめることで単一のクリープ破断曲線を得、これを外挿することで特定材料が特定の条件下で何時間使用可能かという設計曲線を得る。複数の材料の設計曲線から、安全係数を考慮して設計機器の要求仕様を満たす材料を選択する。

これらの語彙は、必ずしも材料科学的な物性や知識から直接に導かれるものではなく、実際に得られたデータと高温機器設計という要求から必要とされる語彙が存在し、長期・短期の影響などそれぞれの評価基準に応じて異なった語彙のセットが用いられている。図では、左上の Diffusion

Properties, Deformation Mechanism Mapなどが材料科学の分野で用いられる語彙を示し、これらとクリープ特性のデータ解析に用いられる語彙との関係を表しているが、異なった材料評価を行う場合には同じ材料科学の語彙から異なったデータ解析に関する語彙セットが関連する。このように、目的に応じて細かくグループに分けられた語彙の間関係を明確にすることもオントロジーの役割の一つと言える。

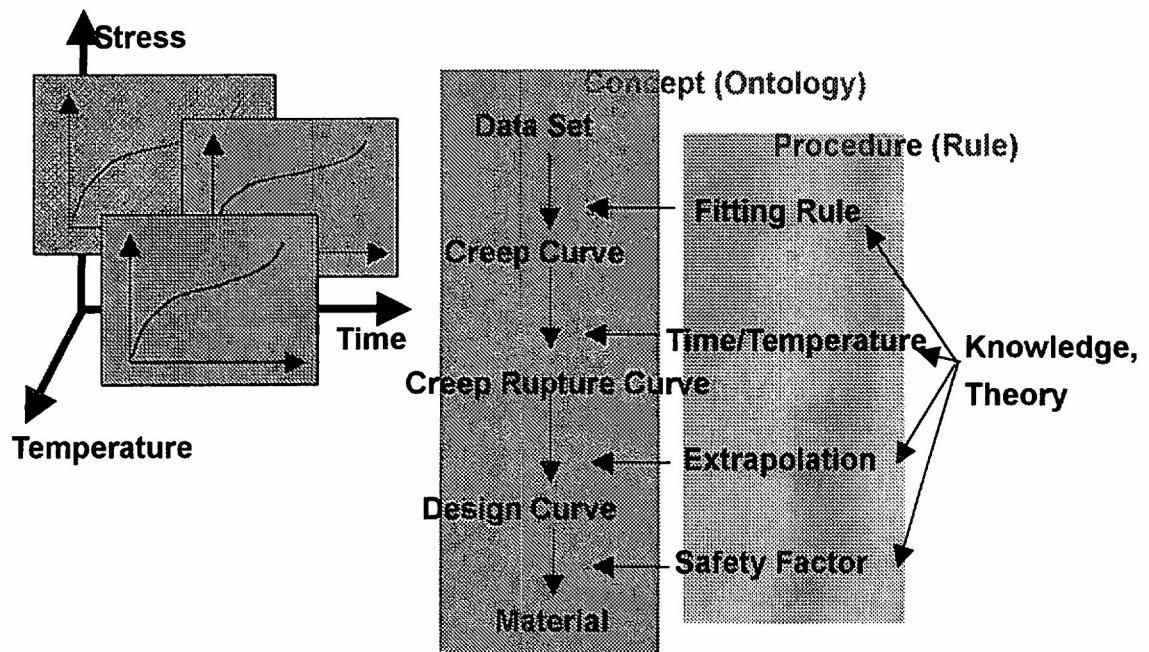


図6 設計時のクリープ特性データ解析の流れ

6. 結 論

ある分野における概念とそれら間の関係を記述するオントロジーは今後、知識の記述を計算機可読化したり、隣接した分野における情報の交換を可能とするために重要であるが、材料分野では材料や物性値の分類に関してはソースの形で整備が進んでいるが、実際にデータを利用するための知識は未整備である。本稿では、高温機器設計に必要とされるクリープ特性を例として関連する語彙とそれら間の関係を明確化し、オントロジーと関連する知識の構造を明らかにした。このことから、実際に材料情報を機器設計などに用いるには目的に応じたパラメータ抽出のためのデータ解析、これに関連する材料化学的な知見に応じた語彙の明確化が必須であることが明らかになった。

参考文献

- 1) <http://www.matml.org/>
- 2) <http://scimarkuplang.comm.nsd.org/>

- 3) <http://suo.ieee.org/>
- 4) The Gene Ontology Consortium: "Gene Ontology: tool for the unification of biology". *Nature Genetics*, Vol.25, pp.25-29 (2000).
- 5) Toshihiro Ashino: "Generating Web Ontology from Material Thesaurus", Proc. of 11th German-Japanese Workshop on Chemical Information, p.8-10, June 12-13, 2003, Kyoto
- 6) 芳須 弘、細谷順子、藤田充苗、芦野俊宏 "インターネット上の材料情報の連携による知見の獲得材料用語のオントロジーを用いた新しい知見の誘発"、第1回情報プロフェッショナルシンポジウム予稿集 (2004)
- 7) D. Pérez-Rey, et. al, "Biomedical Ontologies in Post-Genomic Information Systems", Proc. of the Fourth IEEE Sympo. Bioinformatics and Bioengineering (BIBE'04) (2004)
- 8) Toshihiro Ashino, Mitsutane Fujita, "Web Ontology Definition for Design Oriented Material Selection", Proc. of CODATA 2004 (2004) Berlin

Web Ontology definition for design oriented material selection

Toshihiro ASHINO, Hiroshi YOSHIZU

Several data schema definition of material properties for XML are developed with XML Schema, RelaxNG or other schema definition languages. They give common and exchangeable expression of material data. Next stage toward knowledge management about material usage, selection or processing is to define ontology which represents structure of concepts relate to material. In this paper, the ontology definition of creep properties and usage of it for design process and it's limitations are described.

Keywords : Material Database, Ontology, Knowledge Management