

知識構造化システムにおける機能と性質に関するオントロジー的考察

Ontological Consideration of Function and Quality for a Knowledge Structuring System

垂見 晋也
Shinya TARUMI,

古崎 晃司
Kouji Kozaki,

來村 徳信
Yoshinobu KITAMURA,

溝口 理一郎
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 materials" by changing the structure and/or manufacturing processes with nanotechnology. However, relationship among functions, attributes, structure and manufacturing processes is usually implicit. One of its reasons is ontological ambiguity of the concepts of function, attribute, and property. In this article, we analyze these concepts from an ontological viewpoint and propose a conceptual framework to deal with attribute, property and quality based on the ontological consideration. We also discuss some applications based on our conceptual framework.

1. はじめに

材料分野ではナノテク技術によって「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が材料の機能に関する知識を各領域間で相互に共有・再利用することであるが、現状では十分な知識共有は実現されていない。その背景には、各分野で用いられている「機能」という言葉が様々な意味で用いられ、複数の概念が混在し、十分に識別が行われていない、という問題があると考えられる。材料の機能を表す用語として、例えば「曲げ強度」、「熱膨張率」、「導電性」、「高導電特性」などを文献から拾い出すことができる。しかしながら、いわゆる属性や特性と呼ばれるものとの区別が明確ではない。また、材料研究者が記述した材料機能の実現方法に関する知識を分析したところ、材料の性質改善の方法に関する知識、すなわち材料の性質の「改良行為」に関する知識が記述されているという結果を得た。このことも材料分野において材料の機能と性質に関する概念の混同を示唆していると言える。

そこで本論文では、「性質概念」について詳細に考察し、性質に関する概念の定義・分類を行う。その後、材料分野で用いられている「材料機能」を指す言葉についてそれらの概念を峻別し、性質概念と機能概念との比較を行う。さらにそれらの考察結果に基づいて、材料研究者が構築した材料機能に関する概念階層の洗練を行い、得られる効果と拡張した概念階層を用いた応用システムについて考察を行う。

2. ナノテク材料の性質・属性・特性

ここでは「性質」という概念を出発点に、材料などの物理的存在物の「属性」、「特性」について検討する。物理的存在物はある特定の物理的観点における特徴量を持つ。このような観点を「性質」と呼び、その観点における値を「性質値」と呼ぶ。つまり、モノは性質と性質値の組を複数持つ。以下では「性質」を「属性」と「特性」の2つに大別し、さらなる分類を行う。

2.1 属性

属性とは、定量・定性を問わず、いわゆる値を持つ性質を指す。ここでは属性を「基本属性」と「反応関係属性」の2つに分け、それぞれについて述べる。

(1) 基本属性

基本属性とはその材料に対する入出力に関係なく定義できる属性を指す。例えば「材料の密度」や「原子量」や「バンドギャップ」、「質量」や「長さ」などがこれに相当する。

(2) 反応関係属性

対象とする物質への(何らかの)入力と、それに対する反応の関係性により表される属性を「反応関係属性」と呼ぶ。反応関係属性はその反応の種類から「出力型」と「変化型」の2種類に分けることができる。

• 出力型反応関係属性

例えば、ある物質に電圧を入力として加えた際に、電流が出力される時、物質に加えた電圧の大きさと、流れる電流の大きさの比で電気伝導度という属性が定義される。このように、入力に対して何らかの出力が生じる際の、物質の入力と出力の関係によって表される属性を「出力型反応関係属性」と呼ぶ。

• 変化型反応関係属性

物質に何らかの入力を加えた際、何らかの出力が生じる代わりに、体積変化や温度上昇など物質自体が何らかの変化を起こす場合がある。このような入力と変化の関係性によって表される属性を「変化型反応関係属性」と呼ぶ。ある物質に熱を加えた際にその物質が膨張するとき、その熱量と物質の膨張率で熱膨張率という属性が定義される。ここで入力を「熱量」、変化を「膨張」とすると、熱膨張率は変化型反応関係属性であると言える。また、入力した熱量に対して物質は徐々に膨張する。このような入力と変化の関係を表す属性を「漸化型」の変化型反応関係属性と呼ぶ。

これに対して、曲げ強度は材料の中央に力を加えていき、物質に亀裂が生じた時の力の大きさと定義される。このとき、加える力を入力、「亀裂の発生」を変化とすると、曲げ強度は変化型反応関係属性と言える。しかし、曲げ強度では力がある値を超えるまでは物質に変化が起こらず、その値を超えたときに変化が起こる。このような入力と変化の関係を表した属性を「閾値型」の変化型反応関係属性と呼ぶ。

変化型と出力型と違いはデバイスオントロジーの観点から見ることで明確になる。属性を定義する物質(材料)をデバイスオントロジーにおける「装置」と見なすと、出力型では出力は装置の外に表れる。それに対し、変化型は出力に相当する反応が装置自体の変化として表れる。このように入力に対する反応(出力)

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(溝口研)

〒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

が装置の外側か装置自体なのかという違いが、変化型反応関係属性と出力型反応関係属性の違いであるといえる。

2.2 特性

ここでは物質の性質としての特性について議論する。半導体のインピーダンス特性といったようなグラフの特徴的な形状によって表される特性はこれから行う議論の対象外とする。

(1) 保有特性

ここでは「高電気伝導性」、「高導電性」、「赤色性」を順に例として、保有特性について検討する。まず「高電気伝導性」は物質の電流の流れやすさに関する性質を表したもので「高電気伝導性を持つ・持たない」のように表現される。このような「持つ・持たない」ということに関する性質値をとるような性質を「特性」と呼ぶ。高電気伝導性は前述した「属性」である「電気伝導度」と結びついており、電気伝導度という属性とその値に対して「値定量化」と「値・特性変換」という2つの概念操作を加えた結果であると定義できる。これらの概念操作を合わせて「属性・特性変換」と呼び、属性・特性変換では属性と属性値のセットを入力とし、変換された特性が出力される。以降、それぞれの概念操作について述べる。

● 値定量化

値定量化とは量を値として持つ属性から、特定の閾値と比較して得られる定性属性を値として持つ属性を得る概念操作である。この操作は値に対する操作であり、性質概念自体は変化しない。まず、入力された属性の属性値(定量値)を閾値と比較(値比較)し、その結果にあった定性属性を出力する属性の属性値とする。定性属性とはある閾値(1つまたは幅を持つ)と、そのインスタンスを持つ属性値とを比較した結果として表され、唯一のインスタンスを持つ属性概念である。例えば、ある材料の属性「電気伝導度」の値を100とし、閾値を70とすると、電気伝導度の値を値比較して得られる定性属性は「 $100 > 70$ 」より、「高」という定性属性となる。逆に電気伝導度の値が低ければ「低」となる。定性属性には「高」、「低」以外にも、大きさに関する属性「大」、「小」や色に関する属性「赤」、「青」、「緑」などがある。このような概念操作を行い、最初に入力された属性はその値が定量値から定性属性に変換される。

● 値・特性変換

値・特性変換とは定性属性を属性値として持つ属性に対し、属性値を性質概念に取り込んで特性概念を得る操作である。入力された属性と属性値のラベルを取り出して組合せることで、出力される特性概念のラベルを得て(ラベル概念化)、「ある性質がある値であること」という意味を含むことができる。例えば、ある材料の属性である電気伝導度の値が定性属性「高」のとき、属性と属性値のラベルを組み合わせて「高電気伝導性」という特性概念のラベルを得る。この操作によって、属性と属性値の組から特性概念を得る。

「ある性質がある値であること」を特性概念が含むことによって、その値は「持つ」、「持たない」という意味を持つ Yes, No の2値になる。つまり、値・特性変換が「特性」を得るときの主要な操作であるが、持つ・持たないというためには何らかの基準値(閾値)を参照し、定性化する値定量化の操作が必要となる。

次に「高導電性」という特性概念は高電気伝導性と同様に「電気伝導度」に結びつけられているが、「高絶縁性」と対をなす概念である。つまり、電気伝導度の値を値比較して得られる定性属性のどちらかを「良い」または「好ましい」と見なすかという評価の方法が異なる。ここではこれを「評価観点」と呼ぶ。つまり、上述の値定量化操作において、評価観点を参照した結果とし

ての定性化が異なり、またそれを反映して特性概念も異なってくる。上述した「高電気伝導性」は単に数値の大小をそのまま値定量化(と値・特性変換)に用いており、特定の評価観点に依存していない。

最後の例である「赤色性」は「ものの色の属性値が「赤」であるかどうか」を表す特性概念であり、「色が赤いという性質を持つ・持たない」ことを言うために用いられる。この赤色性も属性・特性変換と同様に定義できる。対応する概念は「色」であり、属性値は実数で表される波長(または周波数)である。まず、閾値のある周波数領域と設定し、属性値と閾値を値比較して色の属性値を「赤」、「青」、「緑」などの定性属性を得る。次に値・特性変換を行い、「色の属性値が「赤」であるかどうか」を表す「赤色性」という特性概念を得る。同様に他の値についても値・特性変換を行って、それぞれ「青色性」などの特性概念を得ることができる。また、赤色性、青色性を一般化すると「色性」という特性概念を得ることができる。これは「ものが特定の色を持つ」ということを表す特性である。このように特性の一般-特殊階層を構成することができる。

以上の考察をまとめると、一般に「特性」とは「ある属性が特定の属性値であるかどうか」を表す性質であり、性質と性質値の組に関する性質である。対応する属性と属性値に対して、以下の一般的な概念操作を施したものと定義できる。

1. 対応する属性の値を1つまたは幅を持つ閾値と比較(値比較)し、対応する定性属性に変換する(値定量化)
2. 定性属性が2つであり、さらに必要があれば値を特定の方向から評価する
3. 性質値に関する分類(定性属性)を性質概念に取り込み(ラベル概念化)、「ある属性の値として特定の定性属性を持つかどうか」という特性概念を得る

このように特性概念は属性概念と密接に関連しているが、値比較によって得られた定性属性を概念内容に取り込んでいる。その結果として「特性を持つ・持たない」という表現が可能となる。

(2) 程度特性

程度特性は、前項の保有特性の概念に基づいて、その値を Yes, No の2値からその程度を表す値をとるように性質概念を変えたものである。例えば、上述の「赤色性」の場合には、保有特性では「赤色性を持つ・持たない」の2値であるが、程度特性は、赤色を表す属性値の区間の中での典型性などに基づいて、例えば「赤色性が高い・中程度・低い」と言う。高導電性の場合には通常「高導電性を持つ、持たない」よりも「導電性が高い、中程度、低い」と言われる。すなわち、程度特性は前述の3つの概念操作に加えて、「その特性を持つ」ことの程度性を表す性質値をとるように、性質概念を概念化したものである。定性属性を値として持つ属性と程度特性との違いは、前者が属性値と特定の閾値に基づいた性質と性質値であるのに対し、後者はある特性を持つことの程度性を表したものであり、特性の定義である「持つ・持たない」を値とする概念に帰着するという点である。

2.3 機能と特性と属性

(1) 機能・特性・属性の関係性

前項までの議論より、「曲げ強度」、「熱膨張率」、「導電性」、「高導電特性」などの材料の性質を明確に分類できたと考えられる。曲げ強度や熱膨張率は変化型反応関係属性に当てはまり、導電性は出力型反応関係属性に由来する程度特性、高導電特性は同じく保有特性に当てはまると考えられる。

ここで、上述の全ての性質が機能と呼ばれる訳ではなく、主に特性を指して材料研究者は「機能」と呼ぶことが多い。例えば

「導電性を向上させた機能調和材料」では反応関係属性を特性化した程度特性を機能と呼び、「高導電特性を付与した機能材料」では保有特性を指していると考えられる。このとき導電性の向上や高導電特性は材料設計者に「望まれた」特性であると考えられる。工業製品設計の分野において、機能を他のものへの望まれた作用として捉えることが多い。これを考慮すると、その特性が「望まれた」ものであるという点から、程度特性や保有特性を材料の機能と捉えているのではないかと考えられる。

また、イオン交換という機能に対して、イオン交換度のような反応関係属性を定義することで、一連の概念操作から高イオン交換性という保有特性を定義することができる。同様に「熱膨張率」という属性に対して「熱膨張させる」といった、対応する機能語彙を抽出して機能表現に変換することができる。このような機能、属性、特性の3通りの記述を相互に変換する操作は全ての属性概念に対して行えるわけではなく、入出力に関係しない属性、すなわち基本属性では行うことができない。言い換えると反応関係属性のみ対応する機能表現に変換することができる。これは機能がある時間における対象物の変化や振る舞いについて定義された概念だからである。また、強度、耐熱温度などの属性には「耐える」「支える」という機能が対応し、より正確に言うならば「形状を維持して自身が持つ機能を発揮する」という機能に対応する。しかし、これらの機能はある物質で注目する機能を発揮する際に副次的に用いられる機能であり、機能としてよりも属性として用いられることが多い。このような議論により、機能・属性・特性は1つの概念を性質と機能の2つの観点から見たものであると考えられ、3つ組関係として捉えることができ、一見異なる性質と機能との関係を明確にすることができると考えられる。

(2) 特性概念と機能概念の類似点と相違点

特性概念には「高導電特性」のように属性・特性変換の結果得られる特性と、「発光特性」のようにある機能を持つ事を示す特性の2種類の特性を考えることができる。これらの特性はどちらも「持つ・持たない」を値として持ち、基盤となる属性値が連続量の場合は、閾値よりも高い・低いで議論されるので、解釈レベルとしても同じ概念ということができる。しかし、スイッチング機能のように属性値が不連続である場合、「(機能として)スイッチング特性を持つ」という場合と「高スイッチング特性を持つ」とでは議論する際に用いる閾値が前者の方が低いと考えられる(「スイッチング機能を持つ」というレベルで用いられる起ち上がり幅の基準値と「高いレベルでスイッチング機能を実現できる」というレベルで用いられる起ち上がり幅の基準値では前者の方が幅が広い)。このように基盤として用いる属性値が不連続である場合、属性由来の特性概念は機能由来の特性概念よりさらに踏み込んだ解釈を行った概念と考えることができる。



図1(左) NIO-Func の上位階層
 (右) 拡張 NIO-Func の上位階層

3. 材料機能に関する概念階層の洗練

3.1 ナノ材料機能の概念階層の洗練

ナノテクノロジー分野の知識を構造化し領域横断的な利用を促進することを目的として開発された「知識の構造化プラットフォーム」¹では、Nano-tech Index Ontology (NIO)と呼ばれるライトウェイトオントロジーを利用したコンテンツ管理を行っている。NIOは材料分野で用いられている用語(概念)を対象に専門家によって構築された概念階層でプロセス、構造、機能、材料、応用の5つのカテゴリから成る。各カテゴリの概念階層は、コンテンツにメタデータとして付与する共通語彙として利用されることを想定し、is-a関係のみを用いて階層化されている。

本研究では、NIOの機能に関する概念階層(本稿ではNIO-Funcと呼ぶ)を、2章で論じた機能と性質に関する考察に基づいて精査し、NIO-Funcの概念階層の洗練を試みた。

図1(左)にNIO-Funcの上位概念階層を示す。NIO-Funcは、材料分野で一般的に材料機能と呼ばれている概念の階層と、材料物性の概念階層から成る。機能は、関連する物性や機能がどのように作用するかなどを分類軸として階層化されている。しかし、NIO-Funcの機能階層には、発光、熱電変換など材料が発揮する機能の他に、強誘電性や強度など性質概念である特性や属性に分類すべき概念が混在していることが確認できた²。特に材料機能とその材料の特性に関しては、材料研究者がほぼ同じ種類の概念として認識していると考えられる。

次に、NIO-Func内で混在している機能や性質の概念を2章で議論した性質概念の枠組みに沿って再分類した。NIO-Funcは152の概念からなる概念階層で、これらの概念を性質概念の枠組みに沿って分類した結果、概念数は194となった(分類のための中間概念が増えたため)。さらに、属性に対応する特性が分類後のNIO-Funcになかった概念については属性・特性変換により新たに生成して追加し(例:熱伝導度から高熱伝導性を生成)、属性や特性は存在するが対応する機能概念がないものに対して新たに機能概念を定義して追加(例:熱膨張率から熱膨張を生成)することで、概念階層を充実させた。さらに、機能概念や特性概念の定義において、それぞれに関連のある属性概念を参照させることで、機能・特性・属性の関連性を明示した。また、これまでの研究で構築済みの性質概念階層[垂見04]に含まれていた概念(57概念)をこれに加えた後、機能概念の階層で材料の機能とするには不適切な概念や、下位概念が存在しない中間概念などを整理し、最終的に概念数は237となった。このようにして得られた概念階層を拡張NIO-Func(上位階層を図1(右)に示す)と呼ぶ。

拡張NIO-Func内の概念の内訳を表1に示す。属性に分類された概念の内、NIO-Funcにあった概念は57で、これらはNIO-Funcを構築した材料研究者も機能の関連概念として認識している。しかし、拡張NIO-Funcで特性に分類された概念の内、NIO-Funcにあった概念は23、その中でも材料機能として認識されている特性概念が13あり、このことから材料分野において機能と性質の概念が混同されていることも確認できた。また、特性や属性から定義追加された機能が4概念、属性・特性変換により追加された特性が12概念ある(中間概念除く)。このような操作を行うことで、拡張NIO-Funcに新たな機能や属性

¹ <http://mandala.t.u-tokyo.ac.jp/>

² ただしNIO-Funcの機能階層は、大まかな分類が主な目的であるため、専門家が「機能ではない」ということを認識した上で概念階層内に混在させているものもある。

表1 NIO-Func および拡張 NIO-Func の概念数の比較

	NIO-Func	拡張 NIO-Func
総数	152	237 (73)
機能	132	58 (4)
性質(物性)	20	179 (69)
		属性
		92 (32)
		特性
		86 (37)

(注1)拡張 NIO-func の列の () 内の数値は拡張 NIO-Func で新たに定義された概念の数

概念を追加しても、機能・特性・属性の関連性に基づいて3つ組関係を明示しながら、概念階層を充実させることができた。

3.2 拡張 NIO-Func を用いた応用システム

ここでは前節で述べた拡張 NIO-Func を用いることで表現が期待される応用システムについて述べる。

(1) 検索システム用のメタデータスキーマとしての利用

拡張 NIO-Func で定義した概念を検索システムにおいてメタデータとして利用し、機能・属性・特性の3つ組関係を検索に用いることで、検索システムの利便性が高まることが期待できる。例えば「電気伝導性が高い材料を調べたい」という状況を想定するとき、通常のキーワードベースの検索システムでは『電気伝導性 高い』のような単語を検索ワードとして入力し、システムは検索ワードと合致したデータを検索結果として利用者に提示する。この時、入力された検索ワードやそれらの組合せと拡張 NIO-Func 内の概念を照合し、機能・属性・特性の3つ組関係を得ることができれば、その関係を用いて検索対象を広げることができる。ここでは「高電気伝導性」という特性概念と合致したとすると、高電気伝導性の他に、機能概念である「電気伝導」や属性概念である「電気伝導度」も同時に検索ワードとできる。これにより、検索対象で用いられている言葉に表記揺れがあった場合も検索結果として得ることができる。

知識の構造化プラットフォームの特許・科研費データベースで検索に NIO-Func を利用した例を挙げると、「高電気伝導性」で全文検索を行った場合、該当文献は 5 件であったが、機能および属性概念を含めた OR 検索を行った結果、該当文献は 561 件となった。また、「光電変換」という材料機能では該当文献は 286 件で、属性や特性を含めると 452 件の該当文献がヒットした。このように拡張 NIO-Func の3つ組関係を検索システムで利用することにより、利用者の関心のある文献をより多く提示することができる期待される。しかし、検索結果を増やすことで利用者には不要の文献まで提示する可能性もあるため、提示した文献が利用者にとって有用なものであるかを、材料研究者の協力を得て検証することを予定している。

(2) 材料機能知識記述への応用

1章で述べたように、材料機能の設計と材料の性質改善のた

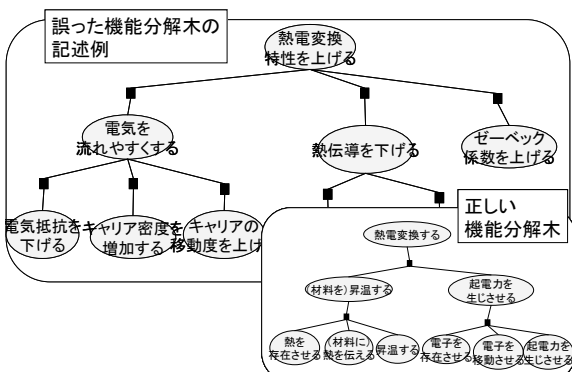


図2 材料機能と改良行為の混在の例(上)と正しい記述例(右下)

めの改良行為との混同が、これらの知識の共有・再利用の妨げの一因となっている場合がある。例えば、図2は材料機能に関する知識を収集するために、専門家の協力を得て記述した機能分解木[來村 02]である。この例では、機能概念と、「熱電変換特性」、「熱伝導」、「ゼーベック係数」のような材料の性質を「上げる」、「下げる」といった改良行為が混同して記述されている。このように機能分解木に馴染みのない専門家が材料機能に関する知識を記述する際の支援にも拡張 NIO-Func が利用できると思われる。すなわち、知識記述システムと拡張 NIO-Func を連携させることで材料機能と性質の改良行為との混同を未然に防ぐことができると期待される。

具体的には、「熱電変換特性を上げる」のように熱電変換特性の改良が機能ノードに記述された際に、特性が機能として記述されたことを拡張 NIO-Func を用いて検知し、記述システムが記述者に対して注意を促す。そして、修正候補として拡張 NIO-Func の3つ組関係から熱電変換特性に関連する機能概念として「熱電変換する」を記述者に提示し、改良行為に関する記述者の意図は対応する機能属性や方式情報[垂見 08]に記述するように修正を促す。このように性質と機能を対応づけた拡張 NIO-Func を知識記述システムと連携させることで機能と性質改良の混同を防ぎ、知識の蓄積をスムーズに行うことができると考えられる。

4. まとめ

本論文では材料分野における材料機能に対する概念の混在を解きほぐすために、性質に関する概念の定義・分類を行った。その際、材料分野だけではなく、一般的な概念としての「性質」について詳細に考察し、性質の「属性」と「特性」という2種類の大きな概念の枠組みと、属性概念から特性概念を得るための概念操作を開発した。このような性質と特性の関係性は BFO[Grenon 04]や DOLCE[LOA]といった著名な上位オントロジーにおいても議論されておらず、オントロジーの基礎理論としても有用な議論であると考えられる。

また本論文で考察した性質概念の枠組みを用いて、材料分野の専門家が構築した材料機能の概念階層の洗練を行った。その結果、材料分野での機能概念と性質概念の混同が確認でき、機能・属性・特性の関連性を明示した拡張 NIO-Func という新しい材料機能と性質の概念階層を得た。この拡張 NIO-Func は検索システム用のメタデータスキーマとしての利用や材料機能に関する知識を記述に利用できると考えられる。今後は専門家の協力を得て、これらのシステムの実装や機能拡張について検討や実装を進める。

参考文献

[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
 [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, 2004
 [垂見 08] 垂見,古崎,來村,溝口,機能発揮・製造プロセス知識統合的記述枠組みに基づくナノテク材料設計支援システムの開発,人工知能学会論文誌, 23(1), pp.36-49, 2008
 [Grenon 04] Grenon, P. and Smith, B. (2004) SNAP and SPAN: Towards Dynamic Spatial Ontology. Cognition and Computation Vol. 4 No. 1, pp. 69-104.
 [LOA] Laboratory for Applied Ontology, <http://www.loa-cnr.it/DOLCE.html>