

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 26 年 5 月 20 日現在

機関番号：32663

研究種目：基盤研究(C)

研究期間：2011～2013

課題番号：23500131

研究課題名(和文) 材料オントロジーの拡張と国際化による材料データ交換手法の確立

研究課題名(英文) Dissemination and Extension of materials ontology for materials data exchange

研究代表者

芦野 俊宏 (Ashino, Toshihiro)

東洋大学・国際地域学部・教授

研究者番号：40302583

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,900,000円、(間接経費) 1,170,000円

研究成果の概要(和文)：材料データを交換するための材料に関するドメインオントロジーの構造についての国際的な合意の形成に向けて、CODATAタスクグループ、欧州標準規格委員会ワークショップなどで活動を行い、RDAにおけるInterestGroupにおける議論を開始した。

また、材料データの活用に重要となる数学的な知識の、Semantic Webのフレームを用いた表現として、OpenMath規格を用い、材料物性に関する数式、実験データ、計算されたパラメータを記述するための標記を開発し、これを用いて産総研熱物性データベース収録の関係式を記述することで問題点を明らかにするとともにプロトタイプの開発を開始した。

研究成果の概要(英文)：We developed materials ontology as a common dictionary for electronic data exchange of materials data on the Internet and organized CODATA Task Group for exchangeable materials data representation in order to establish common infrastructure. Also, collaborated with CEN Workshop SERES, Standards for Electronic Reporting in the Engineering Sector, and tried to achieve electronic data exchange of mechanical testing data of engineering materials.

In materials database, a value of a property is represented as a data point. But values of materials properties are dependent on status, i.e. temperature and pressure. It requires estimation equations to represent these relationships. There are many half-empirical equations but there is no standardized way to store mathematical relationships into materials databases. We developed semantic web based representation of this information and applied it

AIST thermophysical properties database.

研究分野：情報学

科研費の分科・細目：計算基盤、マルチメディア・データベース

キーワード：材料データベース オントロジー Linked Open Data 数学的知識管理

1. 研究開始当初の背景

材料データは多くの分野において基礎的な情報であり、各国の多くの機関においてデータの取得、データベース化が進められてきた。しかしながら、それゆえにデータ構造の標準化などは困難であり、インターネットによる情報の公開・交換が一般的になった今日でも電子的なデータ交換は困難である。代表者らは、Semantic Webの技術を用いて材料データの交換を行うための基盤技術として材料オントロジーを開発し、これに基づいて国際的な標準データ交換フォーマット開発のために、CODATA Task Group などを通じて活動を行ってきた。

また、材料の物性データはデータベース上では数値の点として表されるが、数値シミュレーションなどでは温度・圧力などの異なった条件での値を推算して用いる必要がある。このため、多くの経験式などが蓄積されているが、この記法に関しても標準的な手段がなく、材料データ活用の妨げとなってきた。

2. 研究の目的

本研究では、国際的に利用可能な材料データ交換フォーマットの確立とこの拡張に向けて、国際的な活動のネットワークを確立する。加えて、材料オントロジーの拡張、数式として表される材料物性データを Semantic Web 技術をベースとして記述し、インターネット上の材料データとともに活用するための標準的な手法を開発する。

3. 研究の方法

代表者は CODATA のタスクグループ Exchangeable Materials Data Representation の議長として各国の材料データベース開発者を集めて情報交換を行ってきた。この場を通じて材料データ交換のための国際ネットワークづくりを進める。また、2012年から2014まで設置された欧州標準規格委員会(CEN)のワークショップ、WS SERES (Standards for Electronic Reporting in the Engineering Sector)に参加しており、この場において、材料の機械試験データを電子的に交換するために必要とされるデータ構造・オントロジー定義の国際的な規格策定に向けて活動を進める。

オントロジーの拡張については、産総研熱物性データベースに収録されている熱物性予測のための半経験式を OpenMath 規格を用いて記述し、データベースのプロトタイプを構築するとともに、記述上の問題点を明らかにする。

4. 研究成果

(1) 材料オントロジーの国際化 材料データの電子的な交換を実現するためには、フォーマット、データの意味を表現する語彙、オントロジーなどの共通化が不可欠であり、議論のための国際的なネットワークを維持する

必要がある。

このために 2006 年に CODATA Task Group for Exchangeable Materials Data Representation の設置を提案して認められ、2012 年まで議長を勤め、CODATA 国際会議において材料データベースに関するセッション・ワークショップなどを実施し、アメリカ、ヨーロッパ、中国、韓国、インド、オーストラリアの材料データベース開発者との交流を進めてきた。また、2012 年に開催された第 3 回の AMDS (Asian Materials Database Symposium)でも各国研究者と議論を進めてきたが、各国共に独自の材料データベース開発を進めており、材料オントロジーの共通化は進んでいない。

科学技術データの共有に関しては広く問題点が認識されており、2013 年には、RDA (Research Data Alliance)が活動を開始した。この団体は広くデータ共有のためのインフラ整備を目的とするものであるが、2013 年末には CODATA Task Group との共同で材料データに関する IG (Interest Group)が設置され、3月に開催された第 1 回のミーティングに参加した。

これに対し、EU JRC Institute of Energy のグループは製造業におけるエンジニアリング材料の Certification の観点から、ISO によって定められている機械試験の測定データを電子的に交換するためのデータ形式、オントロジー開発を提案している。このために欧州標準規格委員会 CEN のワークショップ、WS/ELSSI-EMD (Economics and Logistics of Standards compliant Schemas and ontologies for Interoperability - Engineering Materials Data, 2009-2010), WS/SERES (Standards for Electronic Reporting in the Engineering Sector, 2012-2013)が組織されてきた。これらの WS にも当初から参加しているが、議論の結果は 2014 年 中に CWA (CEN Workshop Agreement)として公開される予定である。

このグループでは今後、ISO6892 に規定された機械試験結果の電子的データ形式として同規格の Technical Annex への採択、CEN の Technical Committee 310 - Advanced Production System、仏 CETIM が行っている自動車産業のための電子的データ交換の取り組み、VAMAS TWA35 などと連携して活動を進める予定である。

(2) Semantic Web 技術による数学的関係の記述

多くのデータベースでは材料物性データを測定値の点として収録しているが、実際には物性値は圧力などの諸条件によって変化するものであり、設計やシミュレーションなどに用いるためには実際に実験点のない値を推算しなくてはならない。このため、多くの半経験的な数式が考案され、実験データに対してパラメータをアセスメントすることで実用的な推算式としている。

このような数式をそのままデータベースに収録する場合、文字列として収録するかパラメータのみを収録するのが現在一般的であるが、本研究では、オントロジーや Linked Open Data など Semantic Web の技術をベースにインターネット上のデータや数式処理システムとの連携を可能とするため、数式の意味を記述する形での表記法の開発を行った。このために、OpenMath 規格をベースに産総研熱物性データベースに収録されている数式の記述を行った。

このため、数式をデータベース化するに当たっては多項式と、アセスメントに用いられた実験データセット、得られたパラメータセットをそれぞれ独立に、しかしリンクした形で保存する必要がある。このため、本研究では、多項式を OpenMath のライブラリである Content Dictionary として定義し、得られたパラメータセットを RSS として、実験データはここから参考文献などをリンクする形式で保存することとした。図 1 に、推算式 (1) を OpenMath で記述した例を示す。

$$\varepsilon = 1 - a \exp[b_1 \Delta T - b_2 (\Delta T)^2] \dots \dots \dots (1)$$

$$(\Delta T = T - t_0)$$

```
<CD xmlns="http://www.openmath.org/OpenMathCD">
  <CDName> aist_tpdb1 </CDName>
  <CDBase>http://www.example.org/cd/<CDBase>
  <CDURL> http://www.example.org/cd/aist_tpdb1.ood </CDURL>
  <CDReview Date>2011-11-07</CDReview Date>
  <CDStatus> experimental </CDStatus>
  <CDDate>2011-11-07</CDDate>
  <CDVersion>1</CDVersion>
  <CDRevision>0</CDRevision>

  <Description> This CD defines symbols for AIST TPDB. </Description>
  <CDDefinition>
    <Name> SE1 </Name>
    <Role>application</Role>
    <Description> Spectral emissivity with an exponential function</Description>

  <CMP> SE1(T, L, t0, a, b1, b2) = 1 - a * exp(b1 * (T - t0) - b2 * (T - t0)^2) </CMP>

  <FMP>
  <OMOBJ xmlns="http://www.openmath.org/OpenMath" version="2.0"
  cdbase="http://www.openmath.org/cd">
    <OMA>
      <OMS cd="arith1" name="eq" />
      <OMA>
        <OMS cd="aist_tpdb1" name="SE1" cdbase="http://www.example.org/cd" />
        <OMATTR>
          <OMATP>
            <OMS cd="cc" name="type"/>
            <OMS cd="SI_BaseQuantities" name="temperature"/>
          </OMATP>
          <OMV name="T"/>
        </OMATTR>
        <OMATTR>
          <OMATP>
            <OMS cd="cc" name="type"/>
            <OMS cd="SI_BaseQuantities" name="length"/>
          </OMATP>
          <OMV name="L"/>
        </OMATTR>
        <OMATTR>
          <OMATP>
            <OMS cd="cc" name="type"/>
            <OMS cd="SI_BaseQuantities" name="temperature"/>
          </OMATP>
          <OMV name="t0"/>
        </OMATTR>
        <OMV name="a" />
        <OMV name="b1" />
        <OMV name="b2" />
      </OMA>
    <OMF dec="1.0" />
  </OMOBJ>
</CD>
```

図 1 多項式データ Content Dictionary

この中で、a,b1,b2,t0 がフィッティングパラメータであり、実験結果を元にして求めたパラメータセットとして RDF で記述したものが図 2 である。この中では、図 1 にある多項式 SE1 を参照するとともに、各パラメータの値を与えると同時に、3120K T 4200K、420nm 700nm という得られた式の定義域を与えている。また実験データについては、<dc:relation>タグを用いて元論文の doi を参照している。

本研究ではこの手法を用いて熱物性の数式データベースプロトタイプを開発中であり、固体材料 27 種類、融体 28 種類の比熱とエンタルピーの代表値点列データ 157 件(1 件がグラフ 1 本に相当)について経験式にてフィッティングし、利便性の良い式データを作成し、産総研分散型熱物性データベースに収録した。また、ここで開発した数学的な関係の記述は、物理定数や単位系の次元関係を表記するためにも重要なものであり、現在、材料データを Linked Open Data の一部として活用するための基盤として確立するべくさらなる開発を進めている。

```
<rdf:RDF
  xmlns:rdf="http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#"
  xmlns:dc="http://purl.org/dc/elements/1.1/">
  <rdf:Description rdf:about="tag:www.example.org,2011-11-07:MetalID#16172">
    <dc:description>
      SE=1-0.16096*EXP(-3.7897E-4*(T-3120)-3.2718E-7*(T-3120)^2)
    </dc:description>
    <dc:subject>UO2</dc:subject>
    <dc:type>Spectral emissivity</dc:type>

    <dc:relation>
      http://dx.doi.org/10.1016/S0022-3115(99)00273-1
    </dc:relation>

    <dc:relation xmlns="http://www.w3.org/1998/Math/MathML">
      <apply>
        <csymbol cd="aist_tpdb1" cdbase="http://www.example.org/cd">SE1</csymbol>
        <ci>T</ci>
        <domainofapplication>
          <apply><and/>
            <apply><leq/><cn>3120</cn><ci>T</ci></apply>
            <apply><leq/><ci>T</ci><cn>4200</cn></apply>
          </apply>
        </domainofapplication>
        <ci>L</ci>
        <domainofapplication>
          <apply><and/>
            <apply><leq/><cn>400E-9</cn><ci>L</ci></apply>
            <apply><leq/><ci>L</ci><cn>700E-9</cn></apply>
          </apply>
        </domainofapplication>
        <cn>3120</cn>
        <cn>0.16096</cn>
        <cn>-3.7897E-4</cn>
        <cn>3.2718E-7</cn>
      </apply>
    </dc:relation>
  </rdf:Description>
</rdf:RDF>
```

図 2 RDF によるパラメータセット表現

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文](計 2 件)

Toshihoro Ashino, Yuichiro Yamashita, Development of an Openmath Content Dictionary for Mathematical Knowledge of Materials Science and Engineering, Data Science Journal, 査読有, Vol. 11 2012, PASMD17-ASMD21

DOI:10.2481/dsj.AMDS-004
Yuichiro Yamashita, Takashi Yagi and
Tetsuya Baba, Development of Network
Database System for Thermophysical
Property Data of Thin Films, Jpn. J.
Appl. Phys., 査読有, Vol. 50, 2011,
11RH03
DOI: 10.1143/JJAP.50.11RH03

〔学会発表〕(計 10 件)

山下雄一郎, 馬場哲也, 芦野俊宏, 分
散型熱物性データベースの開発(10)
-OpenMath を用いた数式データの表現-,
第 34 回日本熱物性シンポジウム, 2013
年 11 月, 富山県民会館, 第 34 回日本熱
物性シンポジウム講演論文集,
pp.135-137

Yuichiro Yamashita, Tetsuya Baba and
Toshihiro Ashino, "Semantic
mathematical representation using
OpenMath for equation", Technical
Digest of the 10th Asian
Thermophysical Properties Conference,
2013, 濟州島, p.139

芦野俊宏, 材料データ活用における課
題, CCMR-HDDMPPS(CREST プロジェクト)
第 2 回合同シンポジウム, 東洋大学白山
キャンパス, 2013 年 3 月

Toshihiro Ashino, "Data and
Expressions for Science and
Engineering into e-Journal", 23rd
International CODATA Conference,
Taipei, Oct., 2012

“分散型熱物性データベースの開発(9)
-データの品質管理-”, 山下雄一郎,
馬場哲也, 第 33 回日本熱物性シンポジ
ウム講演論文集, 2012, 大阪市立大学,
p.128-130

Toshihiro Ashino, "Electronic Data
Exchange for Materials Science and
Engineering", IUMRS-ICEM 2012,
Yokohama, Sep., 2012

Toshihiro Ashino, "Development of
OpenMath Content Dictionary for
Mathematical Knowledge of Materials
Science and Engineering", 日本学術会
議主催学術フォーラム「データと発見
-Data Intensive Scientific Discovery」,
2012 年 9 月, 日本学術会議講堂、ポスタ
ー

芦野俊宏, 国際材料データベースの事
例と課題, 日本地球惑星科学連合 2012
年大会 地球電磁気・地球惑星圏学会 デ
ータ問題検討分科会, 2012 年 5 月, 幕張
国際会議場, 招待講演

Toshihiro Ashino and Yuichiro
Yamashita, "Development of OpenMath
Content Dictionary for Mathematical

Knowledge of Materials Science and
Engineering", The 3rd Asian Materials
Database Symposium, AMDS 2012, Japan,
Naha, 17 Apr., 2012

芦野俊宏, 材料データ交換の標準
化 :CEN WS SERES の概要、
CCMR-HDDMPPS(CREST プロジェクト)第 1
回合同シンポジウム, 東洋大学白山キ
ャンパス, 2012 年 3 月

〔図書〕(計 0 件)

〔産業財産権〕
出願状況(計 0 件)

名称:
発明者:
権利者:
種類:
番号:
出願年月日:
国内外の別:

取得状況(計 0 件)

名称:
発明者:
権利者:
種類:
番号:
取得年月日:
国内外の別:

〔その他〕
ホームページ等

科学技術データベース懇談会
<http://www.codata.jp/>

6. 研究組織

(1)研究代表者

芦野 俊宏 (ASHINO, Toshihiro)
東洋大学・国際地域学部・教授
研究者番号: 40302583

(2)研究分担者

岩田 修一 (IWATA, Shuichi)
事業構想大学院大学・事業構想研究科・教
授
研究者番号: 50124665

山下 雄一郎 (YAMASHITA, Yuichiro)
産業技術総合研究所・計測標準研究部門・
研究員
研究者番号: 60462834