

性質データの相互運用のための性質・属性・特性に関する考察

-ナノテク材料分野の性質記述を例として-

A Consideration of Quality-Attribute-Property for Interoperability of Quality Data

-A Case Study of Quality Description in Nanomaterial Domain-

垂見 晋也

Shinya Tarumi

大阪大学産業科学研究所

I.S.I.R. Osaka University

tarumi@ei.sanken.osaka-u.ac.jp

古崎 晃司

Kouji Kozaki

(同上)

kozaki@ei.sanken.osaka-u.ac.jp, <http://www.ei.sanken.osaka-u.ac.jp/~kozaki>

來村 徳信

Yoshinobu Kitamura

(同上)

kita@ei.sanken.osaka-u.ac.jp, <http://www.ei.sanken.osaka-u.ac.jp/~kita>

溝口 理一郎

Riichiro Mizoguchi

(同上)

miz@ei.sanken.osaka-u.ac.jp, <http://www.ei.sanken.osaka-u.ac.jp/~miz>

keywords: ontology, quality-attribute-property theory, nano-materials

Summary

Descriptions of attribute and quality are essential elements in ontology developments. Needless to say, science data are description of attributes of target things and it is an important role of ontology to support the validity of and interoperability between the description. Although some upper ontologies such as DOLCE, BFO, etc. are already developed and extensively used, a careful examination reveals some rooms for improvement of them. While each ontology covers quality and quantity, the mutual interchangeability among these ontologies is not considered because each has been designed intended to develop a “correct” ontology of quality and quantity. Furthermore, due to variety of ways of data description, no single ontology can cover all the existing scientific data.

In this paper, we investigate “quality” and “value” from an ontological viewpoint and propose a conceptual framework to deal with attribute, property and quality appearing in existing data descriptions in the nanotechnology domain. This framework can be considered as a reference ontology for describing quality with existing upper ontology. Furthermore, on the basis of the results of the consideration, we evaluate and refine a conceptual hierarchy of materials functions which has been built by nanomaterials researchers. Through the evaluation process, we discuss an effect of the definition of a conceptual framework for building/refining ontology. Such conceptual consideration about quality and value is not only the problem in nanomaterials domain but also a first step toward advancement of an intelligent sharing of scientific data in e-Science.

1. はじめに

オントロジー構築の要の一つに、象の鼻は長い、鉄は電気を通す、具体物には質量がある、などの対象の属性記述がある。言うまでもなく、科学データは全て対象の属性記述であり、科学データの記述の正当性、相互運用性を支える事は、オントロジーの大きな役割と認識されている [Smith 03]。現在までに、BFO [Grenon 04] や DOLCE [Masolo 03] といったいくつかの上位オントロジーが、それぞれ独自の観点から世界を捉える概念化として提案されている。これらの上位オントロジーはいずれもモノやことの性質 (Quality) を表すための枠組みを

備えている。しかし、これらの上位オントロジーで用意されている性質の記述枠組みはそれぞれに正しい捉え方で表されているが、単独では記述できない性質の記述形式が存在する。例えば、BFO では身長 180cm の太郎の記述は、「太郎は高身長である」や「太郎は 180cm の身長を持つ」のように「太郎が高身長や 180cm の身長という特徴を持っていること」という記述を支えるオントロジーとなっている。その結果、「太郎の身長は 180cm である」や「太郎は身長という属性を持っており、その値が 180cm である」といった記述を受け入れない。一方、DOLCE では「太郎は身長という属性を持っており、その値が 180cm である」という記述を支持するオントロジー

を提供するが、「太郎は高身長である」という記述を受け入れない。また、両者とも同じ太郎の身長について表現しているはずであるが、「高身長」、「身長」および「180cm」の関係は暗黙的である。このような関係が暗黙的となっている結果として、これらの上位オントロジーが備えている性質記述の枠組み単独では記述できない性質記述の形式があることが考えられ、性質記述に関する相互互換性が乏しい。この関係性を明示的に扱うためには、上位オントロジーのモノやことの性質に関する概念や記述枠組み単独では扱えない性質記述をサポートするような性質概念の枠組みを構築することが必要となる。

このような背景の下、本研究では、主に性質に関する知識の相互運用性を向上させるための理論的基盤の確立を目的として、ナノテク材料分野で用いられている性質記述をケーススタディの対象として、モノの性質についてオントロジー工学的に考察し、性質に関する概念の定義・分類を行う。そして、これらの議論の中で、BFO や DOLCE などの既存の上位オントロジーで用いられている典型的な性質概念の記述形式の相互互換性を実現するために必要な性質概念階層を構築する。ここで構築する性質概念階層は上位オントロジーの性質概念に関する参照オントロジーとして位置づけることができると考える。また、本研究で取り扱う性質概念の記述形式における相互互換性の問題は、性質概念が様々な科学データ記述で用いられる概念であり、上位オントロジーの中でも重要な概念の 1 つであるため、オントロジー間の相互運用性に関する問題としても重要な問題の 1 つであると言える。

本稿では具体的性質記述としてナノテク材料分野の性質について考察を行う。材料分野では、ある材料 A の「(電圧を掛けたときの)電流の流れやすさ」に関する性質を表す際に、一方では「材料 A の電気伝導度は 100[S/m] である」と表し、他方では「材料 A は導電性が高い」や「材料 A は高電気伝導性を持つ」と表わされる。このような表現の違いは人間であれば理解することは可能であるが、「電気伝導度」、「高電気伝導性」、「導電性」のそれぞれの関係は暗黙的であり、これらの性質の相互互換性を計算機的に処理するためには、これらが同じ性質を表すための概念であることを示す必要がある。性質に関して考察を深めると、一見まったく異なった概念である「機能」概念とも密接な関係を持ち、混同されることがあることが分かる。実際、材料分野では、高電気伝導性や導電性といった材料の性質を指して「材料機能」と呼ぶことがある。その背景には、各領域において「機能」という言葉が様々な意味で用いられており、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。例えば、「熱電変換」や「発光」のような、材料が果たしている作用を指す言葉に対して「機能」という言葉が使われている。一方、材料が持つ性質の値が、そのドメイン内のコンテキストにおいて「高い、大きい」と考えられるような場合、その性質の値が高いことを指して

「材料が“機能”を持つ」と言われることがある。例えば、上述の「高電気伝導性」や「導電性」、「高強度」を指して「材料機能」と呼んだり、複数の有用な性質を持つ材料を「高機能材料」と呼んだりしている。実際、材料研究者が開発した材料の機能に関する概念階層においても、そのような混同が多く見られ、例えば「耐熱性」、「強誘電性」など材料の性質と考えられるような用語が材料の機能として記述されている [小林 05, 中田 07]。

そこで、材料分野で多くの意味が混同して用いられている「材料機能」を指す様々な概念を峻別し、性質概念と機能概念の違いを明確にすることを目指す。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、性質概念の定義をオントロジー構築・洗練に利用することで得られる効果について考察する。既存の概念階層やオントロジーの洗練は、オントロジー工学における重要な課題の 1 つであり、本研究は材料分野を例とした、性質概念に関する参照オントロジーを用いたオントロジー洗練のケーススタディとも位置づけることができる。また、このような性質と値に関する概念的な考察を行い、性質記述に関する理論と記述枠組みを構築することによって、既存の上位オントロジーを用いて記述、アノテーションされた科学データの知的な相互利用を進めるための第一歩となる議論と位置づけることができると考えられる。

以下、2 章では BFO, DOLCE の 2 つの上位オントロジーが持つ性質記述の概要と、その問題点について詳細に分析する。また、ケーススタディとして用いる、ナノテク材料分野における性質記述に関する問題点を述べる。3 章では、材料分野で用いられている性質記述をケーススタディとして、性質・属性・特性のそれぞれの概念について議論し、さらに、材料分野における機能と性質の関係について議論する。4 章では、3 章で行った議論に基づき既存の上位オントロジーの性質記述の検証と、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、本研究の効果について検討する。5 章では今後の検討課題を述べて、本研究を総括する。

2. 性質の記述に関する問題と材料機能・性質に関する問題

ここでは、既存の上位オントロジーにおける性質の記述に関する問題、及び、性質記述のケーススタディとして用いる、材料分野における機能と性質の概念の混同に起因すると考えられる問題、材料性質の記述の多様性に関する問題について述べ、本研究の目的を明確にする。

2.1 既存上位オントロジーにおける性質記述の相互互換性の問題

前章で述べたような性質記述の多様性の根底には、既存の上位オントロジーでもモノの性質の記述方法が複数

あり、それらに相互互換性が欠けているという問題がある。ここでは、BFO と DOLCE における性質記述の概要とこれらの互換性について述べる。

§1 BFO における性質概念の概要

BFO (Basic Formal Ontology) では、性質は dependent entity の下位概念として扱われ、“Quality” という概念を用いている。この点は後述する DOLCE と同様であるが、BFO では性質と量の区別はされず、特定の値は“Quality” のインスタンスとして扱われている。例えば、「太郎の身長が 180cm である」ことについて、太郎の 180cm という身長がオントロジー化される過程は次のようになる。まず、“Quality” の下位クラスとして「身長クラス (BFO では “determinable” と呼ばれる)」が定義され、その下位クラスに「180cm long クラス (BFO では “determinate” と呼ばれる)」が定義される。次に、そのクラスのインスタンスとして「太郎の 180cm long 身長」という量が定義される。このように、BFO では世界に存在するあらゆる 180cm long の性質はこの「180cm long クラス」のインスタンスとして定義される。このことを平易に言うと、BFO では「太郎は 180cm という長さの身長性質を持つ」と概念化されることを意味する。このような「180cm long 身長」という概念を Property (特性)^{*1} とすると、BFO における “Quality” は Property に相当するといえる。従って、BFO の性質オントロジーに基づく記述では E: Entity, P: Property と略記するとき、〈E, P〉となる。これを太郎の身長の場合で表すと 〈太郎, 180cm long 身長〉と表されることとなる。

§2 DOLCE における性質概念の概要

DOLCE (a Descriptive Ontology for Linguistic and Cognitive Engineering) では BFO と異なり、性質のインスタンスと性質の値を分離することが特徴である。性質と量とを区別していると言い換えることもできる。DOLCE では人工知能研究者になじみの深い概念化を行っており、Quality type (人工知能で言う attribute) と、それが取る値は別の概念階層として扱われている。すなわち、長さ量としての 180cm long は Quality space と呼ばれる世界に存在するインスタンスと見なされ、Quality としての「長さ」は Quality のサブクラスとして概念化される。これを太郎の身長の場合で言うと、〈太郎, 身長, 180cm long〉という 〈E, A, V〉 (A: Attribute, V: Value の略記) 表現を想定していると言うことができる。厳密に言えば、この表現における「身長」はインスタンス扱われたクラス名であるので、DOLCE の性質オントロジーとは厳密には等しくない。DOLCE では、180cm という長さを参照している「太郎身長性質」のインスタンスが太郎の实体に内在していると考えられる。従って、太郎の身長というモノが長さの情報を Quality space の 1 点を値として持つ 1 つのインスタンスとして存在している。このよう

にモデル化すると太郎の身長が時間とともに変化することを素直に概念化したものとなっている。

§3 性質記述の相互互換性の問題

2.1.1 節、2.1.2 節をまとめると「太郎の身長が 180cm である」ということは、BFO, DOLCE のそれぞれの性質記述形式を用いて表現すると、BFO では 〈太郎, 180cm long 身長〉となり、DOLCE では 〈太郎, 身長, 180cm long〉となる。両者とも同じ太郎の身長について表現しているにもかかわらず、「180cm long 身長」と「身長」、「180cm long」の関係は暗黙的である。これは BFO における “Quality” と、DOLCE における “Quality type”, “Quality space” という、それぞれのオントロジーが持つ性質概念の違いに由来するものであり、性質記述形式の間の互換性が乏しくなる原因となっている。

2.2 材料分野での性質と機能の混同と性質記述の多様性の問題

§1 材料機能と性質の概念の混同による問題

前章で示したように、材料分野では「機能」という言葉が様々な意味で用いられており、一方では「発光」のような材料が果たす作用を指し、他方では、その材料のある性質の値がそのドメイン内のコンテキストにおいて「高い、大きい」と見なされる場合、そのことを指して「材料が“機能”を持つ」と言われることがある。このように機能と性質の概念が混同することにより、例えばメタデータを付与した文献管理を行う際に、利用者の意図した通りの結果が得られない場合が生じる可能性があるという問題が起こる。このような問題は情報検索に限らず、計算機を用いた知識共有を阻害する要因となると考えられる。また、計算機を介さない場合、このような問題はさほど大きな阻害要因にはならない場合があるが、異なる領域間で共同研究を行うといった多領域にまたがるコミュニケーションを阻害する一因となる場合もある。このような機能と性質の概念の混同を解消し、これらの概念の関連性を明示することによって、知識共有の促進に貢献しうることが考えられる。

§2 材料の性質記述の多様性の問題

前章で示したように、材料分野では材料の性質が定量的に、あるいは定性的に、様々な言い方で表わされている。例えば、論文や特許文書などの文献に記載されているデータや、研究機関等で提供されているデータベースに蓄積されている科学データの大部分は「電気伝導度: 100[S/m]^{*2}」や「熱膨張率: 60[10⁻¹⁶]」などの定量的な値で扱われている。その一方で、様々なデータからの共通性や大まかな特徴の把握などをしたい場合には、これらの数値がデータ利用者の対象ドメインにおいて大きいのか、小さいのか、というような定性的な扱いが望ま

*2 本論文では“電気伝導度の値が 100[S/m] である”ことをこのような “ ” を使った表記で表す。以下、他の性質概念についても同様の表記を用いる。

*1 特性に関する議論は 3.3 節にて行う。

れることもある。これは材料分野だけの問題ではないが、特に材料分野においては、材料の性質に関するデータを定性的に扱うことによって、材料種などの領域を越えた特徴の把握や傾向の理解に貢献することができ、知識の共有に貢献すると考えられ、材料の性質に関するデータを定性的に扱うためには、性質とその値に関する詳細な議論が必要となる。

このような問題に対処するために、本論文では BFO や DOLCE と異なり、単一の性質オントロジーを構築するのではなく、世に存在する属性記述を例にとり、それらに潜んでいる概念構造を抽出しそれを説明する存在、すなわち参照オントロジーとして位置づけられるような、性質概念の記述枠組みの構築を目指し、その中で、定量的に扱われているデータを定性的に扱うためにはどのような枠組みが必要であるか、さらに、性質とそれに基づく機能概念との関係性を明確にすることを旨とする。

3. 性質概念の分類

ここでは、前章までに述べた上位オントロジーの性質記述の相互交換性を担保するために必要となる、参照オントロジーとして位置づけられる性質概念の分類を、材料分野で用いられている性質表現を例に用いて行う。

「性質」という概念を出発点として、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。本研究では「性質」を「属性」と属性に概念操作を施すことで導出される「特性」の 2 つに大別し、さらなる分類を行う。これ以降、3.1 節では属性が持つ本質的な特徴について考察し、次に 3.2 節では属性が持つ性質である「属性値」について考察する。このように属性と属性値を分類して考察した後、それらの考察結果を構成して得られる属性の分類について述べる。続く 3.3 節では属性から特性を導出する概念操作について考察し、性質概念の分類階層について考察する。

3.1 属性概念の特徴に基づく基礎的 분류

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^{*3}。属性は、その属性を定義するために、材料に対する環境からの刺激やそれに対する材料の反応を表す「入出力」の情報が必要か不要かによって、「基本属性」と「反応関係属性」の 2 つに分けることができる。属性の分類階層を図 1 に示す。以降、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基本的な性質を表す属性を指す。例えば「材料

の密度」や「原子量」、「質量」や「長さ」、「色」などがこれに相当する^{*4}。

§2 反応関係属性

抵抗値のように、対象とする物質への入力（材料への外からの刺激）とそれに対する反応と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

物質への入力に対する反応が何らかの出力として現れるとき、物質への入力と出力との関係で表される属性を「出力型反応関係属性」と呼ぶ。例えば、電気伝導度という属性は、物質に加えた電圧の大きさと、そこに流れる電流の大きさととの比で定義される。ここで加えた電圧を物質への入力、流れた電流を物質からの出力とすると、電気伝導度は出力型反応関係属性であると言える。また、ダイオードのように一方向にしか電流を通さない物質であっても、逆方向に強い電圧を掛ければ電流が流れる。このような電流が流れ始める逆方向電圧は一般に「降伏電圧」と呼ばれている。降伏電圧も電気伝導度と同様に入力を電圧、出力を電流とすると、出力型反応関係属性と言える。ここで、「電気伝導度」と「降伏電圧」の出力の仕方に注目すると、電気伝導度では入力された電圧の大きさに対し、電流はそれに応じて流れるというような入力と出力の関係を表す属性である。一方、「降伏電圧」は入力された逆電圧が特定の大きさ（閾値）以上になると、一気に電流が流れ始めるような、入力と出力の関係を表す属性である。このように、物質への入力に対して、出力がそれに応じて現れるような属性と、ある閾値を超えると出力を生じるような関係を表す属性を考察することができる。ここでは、前者を「漸化型」、後者を「閾値型」の出力型反応関係属性と呼ぶ。

変化型反応関係属性

物質への入力に対する反応が、体積変化や温度上昇など物質自体の何らかの変化として現れる場合がある。このような物質への入力とそれに対する物質自身の変化によって表される属性を「変化型反応関係属性」と呼ぶ。例えば、熱膨張率という属性は、物質に熱を加えた際にその物質が膨張するとき、その熱量と物質の体積の増加分の比率で定義される。ここで物質への入力を「熱量」、それに対する物質の体積増加を「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、曲げ強度は材料の中央に力を加えていき、物質に亀裂が生じる直前の最大の力の大きさとで定義される。このとき、「加える力」を物質への入力、「亀裂の発生」を物質の変化とすると、曲げ強度も変化型反応関係属性と言える。こ

*3 この定義は特性を排除していない。特性の定義に関する議論は 3.3 節で行う。

*4 属性値を「知る」には観測が必要であるので、一見、観測によってしか知り得ない属性値は後述する反応関係属性の値であるように見えるが、オントロジーとしては、観測しなくても対象は観測値に対応する「値」を持っていると考えるのが正しいので、長さなどは基本属性と言える。

で、変化型反応関係属性についても、出力型反応関係属性と同様に、入力に対する物質の変化の仕方に注目すると、「漸化型」と「閾値型」の2種を考えることができる。例えば、熱膨張率は入力された熱量に対して、徐々に膨張するという、入力と変化の関係を表す属性である。一方、曲げ強度は入力された力の大きさが、物質の限界（閾値）を超えた時、亀裂を生じるという変化を表す属性である。このような入力に対して、出力型反応関係属性と同様、物質の変化が徐々に起こるような関係を表す属性を「漸化型」の変化型反応関係属性と呼び、入力がある閾値を超えたときに変化が生じるような関係を表す属性を「閾値型」の変化型反応関係属性と呼ぶ。

変化型と出力型との違いはデバイスオンロジー [Kleer 84] の観点から見ることで明確になる。デバイスオンロジーでは対象世界を、入力を変換して出力をする装置（デバイス）を中心にとらえる。属性を定義する物質（材料）をデバイスオンロジーにおける「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）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。また、反応関係属性を定義する際に、何を「入力」と見なすかは観測者の視点、物理スケール、実験条件などに依存し、それに伴いある属性が「出力型」、「変化型」に分類されるかが変化するが、「何に注目したときに、どの属性概念に分類されるか」が明示されるため、視点の変化による属性の分類には支障は生じない。例えば、「膨張」という性質について属性概念を考える時に、「温度変化」を入力と見なすときは「温度変化に伴う膨張率（熱膨張率）」、時間経過を入力とした時は「時間変化に伴う膨張率」、膨張という変化を入力と見なして、その材料の温度変化を捉えた場合は「膨張に伴う温度変化」というように、それぞれを別の属性概念としてとらえる。このように、反応関係属性において入力・出力・変化をどのように認定するかは、それを扱うドメインや知識記述者によって異なるが、何を入力・出力・変化として捉えているかが明示されるため、適切に属性概念を分類することが可能となる。

ここで、基本属性、反応関係属性の両方に分類することができる属性の例として「色」を挙げる。ものの色は基本属性、反応関係属性のどちらにも分類することが可能である。例えば、「光の色」はその光が持つ色であり、「光の色」というコンテキスト下では色は基本属性と言える。一方、「目の前のコップの色」は、コップの表面に入射した光が、ある波長成分だけを残して反射し、その反射した光の色が「コップの色」となる。そこで「コップに入射した光の色」を入力、「コップから反射した光の色」を出力とすると、「コップの色」というコンテキスト下では色は反応関係属性と分類することができる。一方、食べも

の「味」も「色」と同様に基本属性、反応関係属性の両方に分類できるように見えるが、「味」の概念の成り立ちを考慮すると反応関係属性とはならない。なぜならば、属性と知覚は独立して考えるべきだからである。色自体は確かに人間の知覚に基づいて「分類」されているが、物理的には光の波長自体に色情報が担われているので、色属性自体は光が所有するものと言える。同様に「味」に関して知覚と属性を分離することが可能で、「味」は最終的には人間が知覚することによって得られるものではあるが、例えば、甘い食べ物の基本属性となりうるのは「(人間に甘いと感じさせる) X (という成分) の含有量」であり、その属性を人間が甘いと知覚することから、甘さ属性として「名付けられて」いると考えられる。このように属性の存在自体は知覚と独立していると考えられるので、「味属性」は食べ物の基本属性であると結論づけられ、反応関係属性の例とはならない。これと同様の議論はものが持つ「重さ属性」についても行うことができ、“「重い」という感覚は人間にそのものを持たせたときに生じるため、重さは反応関係属性である”と言えそうであるが、人間が持たなくてもものは（地球上では）重量を持つので、重さは基本属性であることと同型の問題であると言える。このように「色」は基本属性、反応関係属性の両方に分類できる典型的な例の1つであると考えられる^{*5}が、それ以外の属性に関しては基本属性、反応関係属性を一意的に分類することが可能であると考えられる。属性の方向と評価観点

ある属性が定量的な値を持つとき、その値が「増大する方向」と「減少する方向」の方向が存在する。通常は値が増大する方向のみを概念化する場合が多いが、ある属性が表す性質の程度が減少する方向と、値の増大する方向が一致するような別の属性、言い換えると、ある属性の値の増大方向とは“逆方向”に属性が表す性質の程度が増大するような別の属性を考えることができる。例えば、「電気伝導度」は物質の電気の流れやすさを表す属性であるが、電気伝導度の値が減少する方向（電気の流れやすさが小さくなる方向）と、値が増大する方向が一致する属性が存在し、これは一般的に「絶縁率」や「絶縁性」と呼ばれている。絶縁率は「電流の流れにくさ」を表す属性と言え、これが持つ値が大きいことは電流が流れにくいということを指している。このように、ある属性の値の増大（減少）方向に対して、自身の値の増大方向を決めるような概念を「評価観点」と呼ぶ。「絶縁率」は「電気伝導度」に対して「逆方向」の評価観点をを用いて表される属性と言える。

ところで、評価観点をを用いる場合、電気伝導度は「順方向」の評価観点をを用いて表される属性と言える。これは「量」で表される属性は、常に値の増大方向を基準として表されているためである。例えば、「長さ」や「重さ」

*5 筆者らは色以外にこの種の属性を見つけることはできなかった

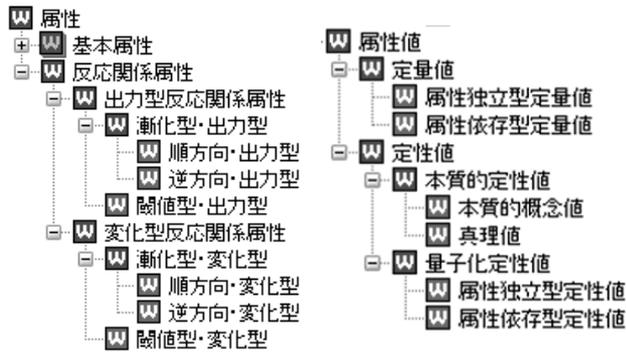


図1 属性の分類階層



図2 属性値の分類階層

は値の増大方向が基準となっており、一般的に「短い」や「軽い」といった言葉は存在するが、それを決定する属性は「長さ」であり、「重さ」である。このように「量」で表されるほとんどの属性は、評価観点を順方向に用いて表されたものであるため、評価観点は暗黙的となり、その結果、評価観点をを用いていないと見なすことができる。よって、評価観点は「逆方向」のみが明示的に用いられると考えられる。

また、評価観点については、その性質上値の増大、減少方向を考慮に入れなければならないため、閾値型の反応関係属性は評価観点を導入するのに不相当だと考えられる。よって、評価観点を逆方向を導入して表される属性は出力型の反応関係属性の下位概念とし、属性の階層は図1のようになる。

3.2 属性値の分類

モノは属性で表される性質を持ち、その属性はある値を取る。属性が取る値を「属性値」と呼び、定量値と定性値の2種類に大別することができる。属性値の分類階層を図2に示す。ここではこれらの属性値の種類について検討する。

§1 定量値

定量値とは「量」で表される値であり、「数」と「単位」から構成され、100[cm]や50[kg]のような長さ量、重量量といった属性に依存する定量値と、変位量といった属性に依存しない定量値に分類される。

§2 定性値

本質的定性値

本質的に定性的な性質を表す概念であり、それが持つ意味が一定であるような定性値を「本質的定性値」と呼ぶ。本質的定性値は、「本質的概念値」と「真理値」に分類できる。

本質的概念値とは、その値となる概念が性質を表す概念として一般的に認定され、その値をもつモノ自体がその概念というカテゴリに分類されるような値を指す。例えば、動物の「生まれ方」を表す「胎生」や「卵生」、モノの形状を表す「円」や「らせん」、「三角」、モノの色を表す「赤」、「青」、「黄」などがこれに該当する。一方、真

理値とは論理学で用いられる真 (True)・偽 (False) に相当する定性値で「持つ」・「持たない」や「Yes」・「No」などがこれに該当する。真理値は定義上本質的であり、例えば「持つ」が指す意味は常に一定である。真理値が「持つ」であるか否かを判断するためには、後述の閾値について考えなければならないが、これは真理値を実世界で用いるために必要な運用上の操作であり、定義上の真理値は閾値を必要としない定性値である。

量子化定性値

量子化定性値とは、定量値を量子化することで得られる定性値のことである。定量値の量子化は、何らかの閾値を設定し、定量値と比較することで行われる。このように定量値と特定の閾値とを比較して定量値を量子化し、定性値を得る操作を「値定性化」と呼ぶ。例えば、ある材料Aの属性「電気伝導度」の値を100[S/m]とするとき、値定性化に用いる閾値を70[S/m]と設定して値定性化を施すと、電気伝導度が持つ値は70[S/m]を境に「高」と「低」の2値に量子化され、材料Aにおいて得られる定性値は「高」となる。この際、比較対象となる閾値は利用者が恣意的に設定して、定量値を定性化することができる。例えば、ある領域で認識されているある属性の基準値を閾値に設定することにより、各材料(インスタンス)の値が閾値によって量子化され、それぞれの材料の性質について「高い」、「低い」と言及することができる。

量子化定性値は、「属性独立型」と「属性依存型」に分類できる。属性独立型の量子的定性値とは、「(数値や程度が)大きい/小さい」、「良い/悪い」といった属性に依存せずに行うことができる量子的定性値を指す。一方、属性依存型の量子化定性値とは、長さが「長い/短い」や重さが「重い/軽い」のように、属性によってそのラベルが変化するような量子化定性値を指す。属性依存型の量子化定性値は、その値をとる属性と属性独立型の量子化定性値を関連づけることによって生成され、例えば、「長い/短い」は属性独立型である「大きい/小さい」と値をとる属性である「長さ」を関連づけることによって生成される。

また、量子化定性値は「大/中/小」のように、定量値を定性化する際に用いる閾値を状況に応じて*6自由に設定し、定量値を2値以上に量子化することも可能である。例えば、「非常に大きい」、「大きい」、「やや大きい」のような量子化定性値は、定量値の量子化を2値以上細分化することによって定義することができる。この際、定性化された値は定量値の性質を継承し、「大」>「中」>「小」の関係は、定性化される前の定量値に依存している。ここまでで議論した属性値の分類階層は図2のようになる。

*6 ここでの「状況に応じて」とは定量値を量子化する際の「粒度」を指しており、「程度」に関しては言及していない。程度に関する議論は[Mizoguchi 09]にて詳細に行っているため、そちらを参照されたい

3.3 特 性

ここでは物質の性質としての特性^{*7}について議論する。本研究では、「属性が特定の値をとる」ということを概念化したものを特性と呼ぶ。特性は定性値を持つ属性とその属性値に対して、属性値を性質概念に取り込む、「値・特性変換」という概念操作を施した結果として導出される。特性は導出元となる値の種類によって、「保有特性」と「程度特性」に分類される。以降、それぞれの特性について述べる。

§1 保有特性

「生まれ方：胎生」や「形状：円」や「色：赤」のような本質的概念値を値を持つ属性とその属性値に対して値・特性変換を施し、「生まれ方・胎生：持つ^{*8}」や「円形：持つ^{*9}」や「赤色性：持つ」のように表される特性概念を保有特性と呼ぶ。これを言い換えると保有特性は本質的概念値から導出される特性概念であり、その保有特性をもつことによってそのモノ自体が、値である概念によってカテゴリ化されているとすることができる。

このような属性値を性質概念に取り込んで、「ある属性が特定の値をとる」ということを表す概念操作を「値・特性変換」と呼ぶ。値・特性変換は定性値を持つ属性とその値に対して行う概念操作である^{*10}。

§2 程度特性

量子化定性値のように定性化された後も、その値自体が順序を持つ属性値とその値をとる属性から導出される特性を「程度特性」と呼ぶ。

程度特性は定量値を取る属性とその値に対して、値定量化と値・特性変換の2種類の概念操作を施して得られる。値定量化によって属性が取る値が定量値から定性値に変換（量子化）され、その定性値と属性を値・特性変換によって性質概念に取り込むことによって、「ある属性が特定の値をとる」ということを表す特性概念となる。例えば、ある材料の属性「電気伝導度」の値を100m/Sとし、閾値を70m/Sと設定するとき、値定量化を施して得られる定性値は「高」となる。次に属性と属性値に対して値・特性変換を施して「高電気伝導性：持つ」となる。また、別の材料の電気伝導度の値を10m/Sとすると、値定量化によって得られる値は「低」となり、値・特性変換を施すことによって「低電気伝導性：持つ」となる。ま

た量子化の細分化によっては「中電気伝導性」といった程度特性を定義することも可能である。

これまでに述べた属性や特性を含む性質概念の階層は図3のようになる。

3.4 機能と性質の関係性の考察

ここでは、前節までの議論から、材料分野において混同されていた性質と機能の峻別を行い、さらに機能と性質（属性と特性）の関係性について議論する。

§1 機能・特性・属性の関係性

3.3節までの議論より、「曲げ強度」「熱膨張率」「高電気伝導性」などの材料の性質の概念を分類し、それぞれの特徴を明確にした。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」という材料設計者による表現では反応関係属性を特性化した程度特性を機能と呼び、「高電気伝導性を付与した機能材料」では程度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では、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程度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に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と考えることができるからである。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る。

ここで、このような属性(Attribute)・特性(Property)・機能(Function)の3つ組関係を表す概念としてAPF-tripleという概念を導入する。APF-tripleは上述の3つ組関係

*7 2.1.1節で述べたように、本論文では特性の英語訳として“Property”を用いる

*8 このように標記することで「生まれ方」が「胎生」であるという性質を「持つ」ということを表している。

*9 特性概念は正式には「属性名・値」のように「ある属性が特定の値を持つ」ということを忠実に示すようなラベルを与えるべきだが、属性名と値を内包するようなラベルを特性概念に与えるときは、これに準じない場合がある。

*10 定量値を持つ属性と属性値に対して値・特性変換を施し、例えば「100[S/m]電気伝導性：持つ」のような特性を導出することは可能であるが、このような概念が一般的な概念として認識されているとは考えにくく、汎用性も低いので、値・特性変換は原則的に定性値を持つ属性と属性値に対して施す概念操作とする。

- ・ 属性
 - 基本属性: 入出力に関係なく定義できる基本的な属性
 - ・ 定性値属性: 定性値をもつ基本属性 例) 生まれ方: 胎生, 形状: 円
 - ・ 定量値属性: 定量値をもつ基本属性 例) 身長: 170[cm], 質量: 50[g]
 - 反応関係属性: 入力とそれに対する反応との関係によって定義される属性
 - ・ 出力型: 反応が出力のように現れる
 - 漸化型: 出力が入力に応じて現れる 例) 電気伝導度
 - » 順方向
 - » 逆方向
 - 閾値型: 入力がある一定値(閾値)を超えると出力が現れる 例) 降伏電圧
 - ・ 変化型: 反応が対象自身に現れる
 - 漸化型: 変化が入力に応じて徐々に現れる 例) 熱膨張率
 - » 順方向
 - » 逆方向
 - 閾値型: 入力がある一定値(閾値)を超えると変化が起こる 例) 曲げ強度
- ・ 特性
 - 保有特性: 本質的概念値を持つ属性から導出される特性 例) 生まれ方: 胎生: 持つ, 円形: 持つ
 - 程度特性: 量子化定性値を持つ属性から導出される特性

図 3 性質概念階層 (斜体部分は概念の定義や例)

で捉えることが出来る機能, 属性, 特性の 3 概念の関係を定義したものであり, これらの 3 概念によって構成される. 例えば, 図 4 左上の「電気伝導 triple」とは「電気伝導」という機能, 「電気伝導度」という属性, 「高電気伝導性」という特性の 3 つ組関係を表している. また「電気伝導度」という属性に対して「逆方向」の評価観点を用いて表される「絶縁率」という属性を考慮することができ, 絶縁率を変換することで「高絶縁性」という特性を得ることができる. このような評価観点を用いて表された属性を経由して導出された特性と, その属性に対応する機能という 3 つ組関係を表すために「Evaluation-triple」という概念を新たに導入する. Evaluation-triple は APF-triple を構成する機能・属性・特性の 3 種類概念に, 特性を導出する際に経路した属性が「逆方向」という観点を用いているということを表す概念 (評価観点) を加えて定義される. 例えば, 電気伝導度に対して逆方向の評価観点を用いて表された属性 (絶縁率) を経由して変換された「高絶縁性」を特性を持つ Evaluation-triple を「電気伝導 N-triple」と呼び図 4 のように表し, 電気伝導 triple の下位概念として定義される*11. これにより, 高絶縁性といった評価観点を用いて表される属性 (絶縁率) を経由して導出された特性と機能・属性の 3 つ組関係と合わせて, 高電気伝導性といった評価観点を用いない属性から導出された特性との関連性も明示することができる.

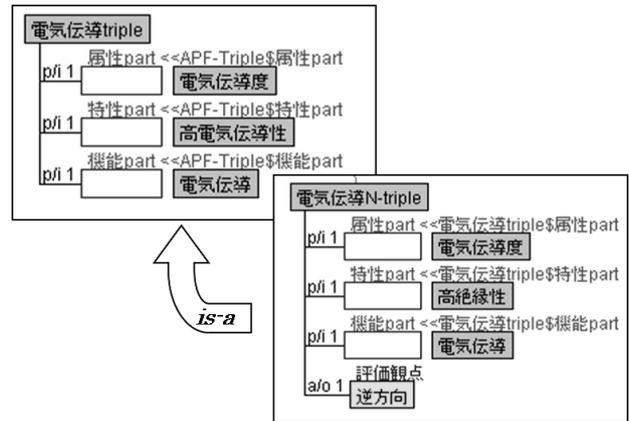


図 4 APF-Triple と Evaluation-Triple

4. 性質概念の分類の有用性に関する考察

本章では, 前章で行った性質概念階層の構築と材料分野における材料機能と性質の関係に関する議論の有用性について考察を行う.

4.1 上位オントロジーにおける性質記述形式の相互交換性の考察

本節では, 図 5 左に示す上位オントロジーにおける性質の記述例を元に, 前章で議論した属性, 属性値, 特性の概念と比較し, 本研究で構築した性質概念の枠組みの記述能力を検討する. 以降, 図 5 中・右に示すように, 前章で議論した属性, 特性, 属性値の分類階層について, 最も下位の概念を属性 (Attribute) は A1 ~ A8, 特性 (Property) は P1 ~ P2, 属性値 (Value) は V1 ~ V6 と, それぞれ略記して表す.

§ 1 BFO に基づいた性質記述での考察

BFO では <E, P> 型でモノの性質を表している. 例えば「He is tall」では「tall」が「He」の性質を表しており, 「tall」は「身長」という属性が「高い」という値である」

*11 「高絶縁性」は「電気伝導度」という属性に対して「逆方向」の評価観点を用いて表される「絶縁率」という属性を変換して得られた特性であり, 一方「高電気伝導性」は「電気伝導度」という属性に対して変換して得られた特性である. 「電気伝導度」を含めたほとんどの属性は, 順方向の評価観点を用いて表されたものであるため, 評価観点が暗黙的となり, 結果として「評価観点を用いない」と見なすことができる. このため図 4 では, 便宜上「電気伝導度」に対して「逆方向」の評価観点を用いて表された属性「絶縁率」を変換して得られた特性「高絶縁性」を「電気伝導度」に対して評価観点を用いずに変換して得られた特性「高電気伝導性」の下位概念としている.



図5 BFO, DOLCE, Galen での性質記述の例と、属性・特性・値概念の対応付け

ことを指しており、特性に分類されるといえる。厳密にいうと tall は程度特性といえることができる。また、「He is 180cm high」も「彼は「身長という属性が 180cm である」という性質を持っている」と言い換えることができ、「180cm high」も程度特性に分類できる^{*12}。同様に「This rose is red」も「red」が本質的概念値「red」と属性「color」から導出された保有特性と分類できる。すなわち、BFO では <E, P1>、または <E, P2> で表すことができる。ここで 2.1.1 節で触れた BFO における“determinable”と“determinate”について述べる。「身長クラス」は determinable、「180cm long クラス」は determinate にそれぞれ対応し、一見すると determinable が属性、determinate が属性値であるように思われる。しかし、BFO では determinate をインスタンス化し、もの (Entity) に結びつけることによってものの性質を表しており、このインスタンスは「身長 (という属性) が 180cm (という値) であること」を表すものである。これは 3.3 節で述べた特性の定義にそのまま当てはまり、determinate のインスタンスは特性であると言える。ただ、それを性質のインスタンスとしてモデル化されるので、特性とは異なった点を持っている。

また、BFO には“disposition”という概念が定義されている。[Spear 06] では disposition の例として、“the disposition of metal to conduct electricity”が挙げられている。これは一見すると材料の「電気伝導」という機能に対応するように思われるが、disposition の他の例として“the disposition of vegetables to decay when not refrigerated”, “the disposition of a vase to brake if dropped”, “the disposition of blood to coagulate”, “the disposition of a patient with a weakened immune system to contract disease”が挙げられている。[Spear 06] では disposition

の定義は“X (object) has the disposition D to (transform, initiate a process) R under conditions C”となっており、X が持つ disposition D は、R というプロセスが C という条件下で起こりうる (起こりやすい) と言える。これを言い換えると disposition は、“R というプロセスの起こりやすさ (属性)”が“高い (値)”ということをしており、「ある属性がある値であること」と示す「特性」と位置づけることができる。これに加え、C という条件は X に対する刺激 (入力) に対応づけることができるため、disposition は反応関係属性とそれが持つ値から導出された特性と位置づけることもできる。このように BFO の disposition のあるものに関しては反応関係属性から導出された特性として捉えることができ、あるものは基本属性から導出された特性とも捉えることができる。

§2 DOLCE に基づいた性質記述での考察

DOLCE では <E, A, V> 型でモノの性質を表わすことを支持している。例えば「His height is high」では、Entity として「He」がいて、He は「height」という性質 (属性) を持ち、その値が「high」と読み替えることができる。値が「high」という定性値 (属性依存型・量子化定性値) であるが、high は定量値を定性化して得られる概念なので、「height」は定量値属性と言える。次に「His height is 185cm」も同様に Entity に「He」, 「height」が定量値属性、「185cm」が属性依存型定量値と読み替えることができる。これを図5の記号で表すと <E, A1, V2> となる。また「The color of this rose is red」は Entity が「this rose」, 「color」が定量値属性、「red」が本質的概念値と読み替えられ、これを記号で略記すると <E, A1, V3> と表すことができる。

§3 GALEN に基づいた性質概念の記述での考察

GALEN[Rector 96] とは Alan Rector らによって開発された医療オントロジーであるが、そこでの記述は、医療における属性記述の性質を反映して、<E, P, V> という表現をとっている。例えば、「Being red of this rose is high」のような表現が GALEN では用いられている。

*12 「180cm high」は値定性化を省略して直接、値・特性変換を適用して得られた特性概念であり、厳密には 3.3.2 節で述べた程度特性の説明と異なるが、程度特性は定量値に由来として得られる特性概念であるので、便宜上程度特性に分類する。

「Being red」とは、「(色)赤いこと」ということを表しており、「色という属性が赤という値を持つ」と言い換えることができ、Being red は保有特性であると言える。そして、その値が「high」という属性独立型・量子化定性値であるので、これを記号で表すと $\langle E, P1, V5 \rangle$ となる。また、「Diarrhea of this patient is severe」という例において、Entity を「this patient」とすると、Diarrhea (下痢) は this patient の症状を表しており、医師の所見によりある一定の評価基準から「this patient」には Diarrhea という症状があり、その程度が「severe」であることを表している。ここで Diarrhea が「便の水分量が基準値よりも多いこと」を表しているとする、「便の水分量」は属性、「多い」は属性値とみなせるので、Diarrhea は特性の定義を満たす。そして、その値が「severe」という属性独立型・量子化定性値ということが出来る^{*13}ので、これを記号で略記すると $\langle E, P2, V5 \rangle$ となる。

これまでの BFO, DOLCE, GALEN での性質記述の例をまとめると図 5 左のようになる。この例からも明らかのように、BFO や DOLCE の性質オントロジーだけでは現実に存在する多様な表現を素直にサポートできないだけでなく、これらの 3 種類の性質表現が相互にどのような関係にあるかを明示することもできない。これは哲学的な面を強調して、存在を最も美しく説明する概念化を追求するという姿勢では、現実から実際に要求される性質記述の意味的相互運用性を担保することには十分でないことを示唆している。それに対し、3 章で議論した性質と値に関する概念階層及び値・特性変換のような概念操作は、それぞれの記述が性質をオントロジー的にどのような概念として捉えているかを明確にし、それらの相互運用性を担保するために必要な概念(参照モデル)を提供していることがわかる。

4.2 性質概念の分類に基づく材料機能に関する概念階層の洗練と有用性の考察

ここでは材料研究者が構築した材料機能に関する概念階層を、前章で行った議論に基づいて洗練し、材料機能と性質の関係性に関する議論の有用性を検討する。

§1 ナノ材料機能の概念階層の洗練

NIO-Func

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」^{*14}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 [Kozaki 07]。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、約 1 万の概念から成る。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 の機能に関連する概念階層(本稿では NIO-Func と呼ぶ)を、3 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 6 に NIO-Func の概念階層の一部を示す。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なる、概念数 152 の概念階層である。しかし、NIO-Func の機能階層では「機能」の下位概念に「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同列に並べられていたり、「イオン伝導」という機能の下位概念に「ホール伝導度」、「酸化物イオン伝導度」などの属性が記述されていたりと、機能と性質が is-a 階層内で混在していることが確認できた^{*15}。このように材料機能とその材料の性質に関しては、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。

拡張 NIO-Func の構築

ここでは、NIO-Func の概念階層を洗練し、構築した拡張 NIO-Func について述べる。

まず、NIO-Func 内で混在している機能や性質の概念を 3 章で議論した性質概念の枠組みに沿って再分類した。この再分類では、NIO-Func 内にある概念を機能と性質に大別し、性質に分類される概念をさらに特性と属性に分類した。この操作によって、「ホール伝導度」や「酸化物イオン伝導度」が反応関係属性に、「親水性」、「弾性」、「流動性」などが程度特性に再分類された。再分類後の NIO-Func を便宜上「NIO-Func+」と呼ぶ。さらに、前章で述べた APF-triple を NIO-Func+において定義し、機能・属性・特性の 3 つ組関係を明示した。拡張 NIO-Func 構築に際して、APF-triple は以下の方針に従って作成した。なお、各項目において、拡張 NIO-Func 構築に際して補完された概念の具体例を示した。

- a) NIO-Func+内に 3.4.1 節で述べた 3 つ組みとなる機能、属性、特性概念の組が既に存在する場合は、それらの概念からなる APF-triple を作成する。(例)「誘電」、「誘電率」、「強誘電性」という機能、属性、特性が定義されていた場合、この 3 つの概念からなる APF-triple 「誘電 triple」を定義する。
- b) 3 つ組となる機能・特性・属性の内、いずれかが存在しない場合、以下のように概念を作成し、3 つ組関係となる概念を揃えた上で APF-triple を作成する。
- b)-(i) NIO-Func+内の属性について、対応する特性が存在しない場合は、属性・特性変換を行って特性概念

*13 厳密には、ここでの severe は下痢の程度を表す程度値に分類される。程度値も属性には依存せずに用いることができるので、便宜上属性独立型・量子化定性値に分類した

*14 <http://mandala.t.u-tokyo.ac.jp/>

*15 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概念も含まれている。

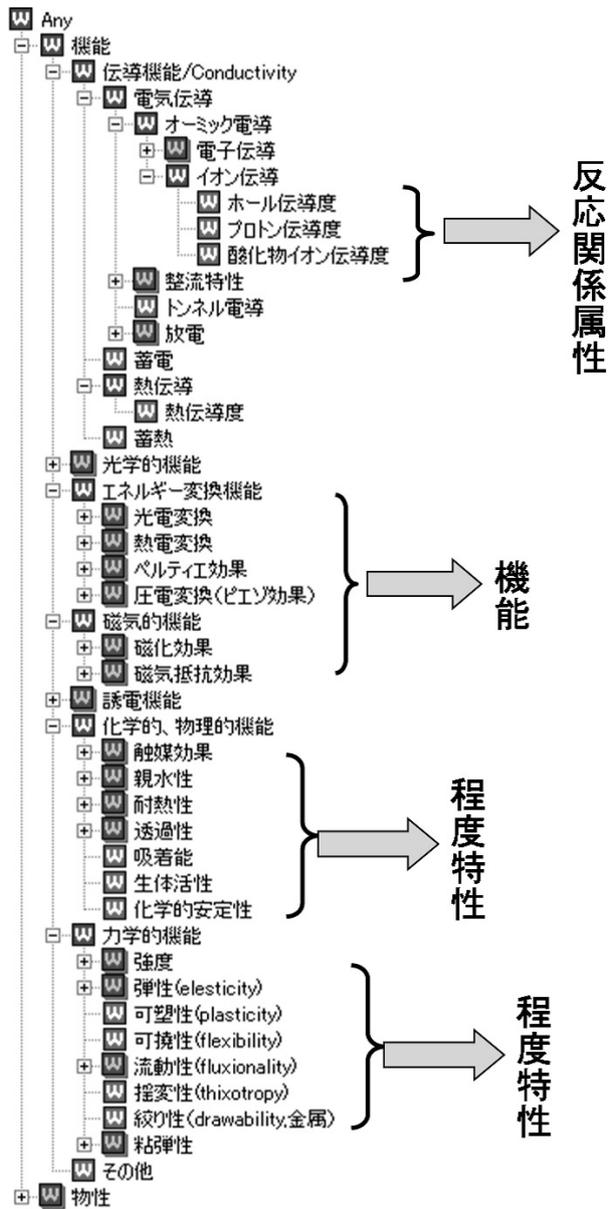


図6 NIO-Funcの階層(部分)と拡張 NIO-Func 内での分類先

を作成する。例)「光電変換効率(属性)」に属性・特性変換を施し、「高光電変換効率性(特性)」を作成する。

- b)-(ii) NIO-Func+内の属性や特性について、対応する機能が存在しない場合は、それらに対応する機能概念を定義する。例)「熱放射率(属性)」に対応する機能概念「熱放射」を定義する。
- b)-(iii) NIO-Func+内の機能について、対応する属性、特性が存在しない場合で、機能に対応する代表的な属性が材料分野の用語として存在する場合には、その用語を機能に対応する属性とし、さらにその属性を特性に変換して、これらを3つ組として APF-triple を作成する。例)「光反射」という機能に対して、「光反射率」は対応する代表的な属性であると考えられることができるため、それを3つ組を構成する属性

とし、さらに「高光反射性」という特性に変換して「光反射 triple」という APF-triple を作成する。

- b)-(iv) NIO-Func+内の機能について、対応する属性、特性が存在しない場合で、機能に関連する属性が複数考えられ、そのどれもが代表的な属性と認定できない場合には、それらの属性は拡張 NIO-Func には追加するが、その機能に関する APF-triple は作成しない。

このような方針に従って、APF-triple 作成を意識しながら NIO-Func+に新たな概念を追加した。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(44 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(例: レオロジー(物質の変形および流動一般に関する学問分野)の概念)や、下位概念が存在しない中間概念などを整理した(表1の「削除」の項を参照)^{*16}。

拡張 NIO-Func 構築操作での概念数の遷移を表1に示す。このような概念階層の洗練を行った結果、次のようなことが言える。まず、NIO-Func において、材料機能として定義されていた132 概念のうち、拡張 NIO-Func では45 概念が属性に分類され、23 概念が特性に分類された。これにより NIO-Func で混同されていた機能と、属性や特性の性質が NIO-Func の洗練を行った結果、概念の混同を解消することができ、オントロジーとしての正確性が向上した。次に、APF-triple の作成に際して、属性や特性から変換された機能が12 概念(上述の b)-(ii) の操作)、機能属性として追加された属性3 概念(b)-(iii) の操作)、属性の概念操作によって作成された特性30 概念(b)-(i) の操作)が追加された。このような操作によって NIO-Func では記述されてなかった概念を、拡張 NIO-Func の構築によって補完することができ、さらに機能・属性・特性の関係性を明確にすることができた。

なお、本論文で構築した拡張 NIO-Func について、NIO-Func を構築した材料研究者に意見を求めたところ、下記のような見解を得た。

まず、NIO-Func 階層のリーフに現れる概念(図6の「ホール伝導度」など)については、「その機能を表現する“物性”を示し、それらの物性を用いて材料の研究者が必要とする“機能”を定量的にインデックスすることを意図していた^{*17}とのことであった。これを、本論文では「属性」として定義し、機能との関係を明示することで材料の専門家の意図をより正確に表すことができたと語る。

*16 ここで、拡張 NIO-Func を材料の機能や性質を表すオントロジーとして捉えた場合、「属性」の下位概念として定義された概念、特に機能と関連づけられる属性のほとんどが、その機能をコンテキストとしたロールホルダ[古崎 02]であると言える。しかし、拡張 NIO-Func は材料の機能や性質に関する「概念階層」として構築しているので、本来ならばロールホルダとして記述されるべき属性概念を拡張 NIO-Func 内では機能と同様に基本概念[古崎 02]として扱っている。

*17 ただし NIO-Func はインデックスに用いる is-a 階層のみで表現されているため、その意味が暗黙的にされていた。

表 1 拡張 NIO-Func 構築操作での概念数の遷移

		拡張 NIO-Func			合計	削除
		機能	属性	特性		
NIO-Func	機能	54	45	23	132	10
	物性	0	10	0	20	10
NIO-Func 洗練の操作	NIO-Func+構築の際、追加した中間概念	0	23	43	66	
	性質概念階層から追加された概念	0	20	24	44	
	APF-triple 作成の際に追加された概念	12	3	30	45	
拡張 NIO-Func 概念数 (合計)		64	101	110	275	

次に、材料研究者が“機能”として扱いたい内容には、

- 光電変換機能のようにその有無が明確であるもの
- 「～ジメンス以上の電子伝導度」のように特定の物性がある一定の条件（例えば、何かのデバイスに用いるための条件）を満たすような特徴を有することが考えられるとのことであった。これらは、それぞれ本論文で提案する「機能」と「特性」に対応づけることができる。すなわち、本論文における提案は、材料研究者が“機能”として捉えている内容に「機能」と「特性」に相当する 2 種類があることを明示したことに相当すると言える^{*18}。以上のように、本論文で構築した拡張 NIO-Func の内容は、材料研究者が“機能”を捉える際に必要と考えている内容と一致していることが確認できた。

本節で行った NIO-Func の洗練は、オントロジー工学における重要な課題の 1 つであるオントロジーや概念階層の洗練の材料分野を例としたケーススタディであると位置づけることができ、オントロジー工学においても意義のある議論であると考えられる。

§ 2 拡張 NIO-Func の文書検索支援への応用可能性の考察

ここでは、拡張 NIO-Func の拡張によって補完された機能・属性・特性概念とそれらの概念の相互互換性の利用方法の一例として、文書検索支援の応用可能性について述べる。

拡張 NIO-Func 構築の際に導入した APF-Triple 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「高電気伝導性を持つ材料を調べたい」という状況を想定する時、従来の検索ならば「高電気伝導性」というキーワードだけで検索を行うが、このようなキーワードと拡張 NIO-Func 内の概念とを照合し、機能・属性・特性の 3 つ組関係を得ることができれば、検索対象を広げることができる。ここでは「高電気伝導性」という特性に関係づけられた「電気伝導」、「電気伝導度」という機能概念、属性概念をキーワードとすることができる。

このような検索支援の可能性を確認するために、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を対象とした検索システムを試作し、拡張 NIO-Func 内の概念を用いて簡易実験を行った。「吸着能」で全文検索を行った場合、該当文献は 89 件であったが、属性（「濡れ角」: 3 件）および特性概念（「親水性」: 2386 件）を含めた OR 検索を行った結果、該当文献は 2418 件となった。同様に、1 つの概念だけを検索した結果と、3 つ組関係を用いた OR 検索を行った結果の一部を表 2 (表 2) に示す。表中の「機能」、「属性」、「特性」の項にはそれぞれの検索ワードで検索した結果を表し、「3 つ組 OR 検索」では、APF-triple で関係づけられた 3 つの語彙を検索ワードとした OR 検索の結果を表している。しかし、「高絶縁性」といった 3・1・2 節で述べた「電気伝導度」という属性に対して逆方向の評価観点をを用いて表される属性（絶縁率）から導出された特性概念をキーワードとして本手法で検索する場合、利用者の意図とはかけ離れた検索結果が得られる可能性もあり、本手法の実用化に際してはさらなる検討が必要であると考えられる。

このように検索範囲を元のキーワードの他に APF-Triple で関係づけられた概念を加えることによって、利用者に有用な文献をさらに多く提示できることが期待できる。なお、本節での議論及び実験結果は、前節で洗練・構築した拡張 NIO-Func 及び APF-Triple の知的システムへの応用可能性の示唆に留まるものであり、この結果をもって本論文の情報検索における有用性を主張するものではない。

5. ま と め

本論文では、BFO や DOLCE といった既存の上位オントロジーが有する性質の記述形式単独では表すことができない性質記述形式があるという点に着目し、それら相互にサポートするような性質概念階層の構築を行った。その際、物理的存在物を「どのように捉えるか」ということ（性質）と、その観点において「どのような特徴量が存在するか」ということ（値）の 2 つの事柄について、性質の種類と値の種類を独立に考察を進めた。その結果、「モノをどのように捉えるか」という観点を表す「属性」、「その観点における特徴量」を表す属性値、「ある属性が特定の属性値であること」を表す特性という、モノの性質

*18 実際に材料研究者が本オントロジーを利用する際には、「機能」と「特性」の上位概念として「材料機能」といった概念を導入するなどの工夫をすると、より専門家の理解が得られやすいと思われる。

表2 検索結果の例(一部)

	吸着能 (F) 濡れ角 (A) 親水性 (P)	触媒効果 (F) 反応促進率 (A) 高反応促進性 (P)	電気伝導 (F) 電気伝導度 (A) 高電気伝導性 (P)
機能 (F) で検索	89	43	656
属性 (A) で検索	3	1	271
特性 (P) で検索	2368	0	8
3 つ組 OR 検索	2418	44	656

を表す概念をオントロジカルに定義・分類することができた。このような性質、属性、特性、値に関する概念階層を構築することによって、BFO や DOLCE の性質オントロジーだけではサポートできなかった、多様な性質に関する表現を可能にするだけでなく、これらの上位オントロジーで記述された性質記述の内容の意味的相互運用性が保証されるようになると考えられる。さらに、構築した性質概念階層を性質概念の参照オントロジー^{*19}として位置づけることにより、モノやことの性質に関する科学データの知的な相互利用を進めることに貢献しうると考える。

ここで、オントロジー間の相互運用性に関連する研究と本研究の位置づけについて述べる。まず、上位オントロジーにおける性質記述形式の不整合に対する問題を概念的な問題から取り組んだ研究は筆者らが初めてであると考える。また、一般のオントロジー間の相互運用に関する問題は「オントロジーマッピング (Ontology Mapping)」や「オントロジーアライメント (Ontology Alignment)」という研究コミュニティが形成されており、オントロジー研究の主要なテーマの1つとして様々な取り組みがなされている。例えば、UMLS (Unified Medical Language System) [NLM 04] という、医療ドメインで構築されているオントロジーや語彙階層を統一的にカバーするようなオントロジーの研究や OBO Foundation [OBO 07] のような研究がなされている。このような問題に対するアプローチには2通りあり、概念の近似性などを計算して機械的に関連付けるというアプローチと、概念定義から深く考察して人手で関連付けるアプローチがある。本研究は上位オントロジーにおける性質に関して概念定義から考察して性質記述の対応づけを行っているの、後者のアプローチであると言える。

また、本論文では、このような性質記述に関する問題のケーススタディとして、材料分野における性質の記述方法の混在や、材料の機能と性質との概念の混同という例を用いて、構築した性質概念階層の有用性について考察した。また、性質概念の定義に基づいて、材料分野に

おける機能概念と性質概念の違いを明確にし、機能・属性・特性の3種類の概念の関係性を表す「APF-triple」を導入することで、一見異なるように見える材料が持つ“性質”と“機能”との関係を明確にすることができた。さらに、材料研究者が構築した材料機能に関する概念階層 (NIO-Func) を性質や機能に関する考察に基づいて洗練する作業を行った。これはオントロジー工学の重要な課題の1つである参照オントロジーに基づく既存オントロジーや概念階層の洗練の、材料分野を例としたケーススタディとして位置づけることができる。また、その洗練結果として得られたオントロジー (拡張 NIO-Func) を用いた文書検索支援への応用可能性について考察し、性質概念の相互運用性と機能・属性・特性の相互互換性の利用の一例を示した。

今後は、構築した性質概念階層を性質の参照オントロジーとして、様々な形式で記述された性質に関する科学データの相互運用を行うような、性質知識変換システムの開発について検討を進める。

謝 辞

本論文で用いた NIO-Func は「知識の構造化プラットフォーム」開発の成果であり、また本論文であげた例の一部は同プロジェクトにおける議論の中で得られたものである。ここに同プロジェクトに関わられた方々に感謝の意を表す。

◇ 参 考 文 献 ◇

[Grenon 04] Grenon, P., Smith, B., and Goldberg, L.: *Biodynamic Ontology: Applying BFO in the Biomedical Domain*, pp. 20-38, IOS Press (2004)

[Kleer 84] Kleer, de J. and Brown, J.: A Qualitative Physics Based on Confluences, *Artificial Intelligence*, Vol. 24, pp. 7-83 (1984)

[小林 05] 小林 明: スマートプラズマ溶射システムによる新機能性材料の創製, 表面技術, Vol. 56, No. 11, pp. 660-664 (2005)

[古崎 02] 古崎 晃司, 來村 徳信, 池田 満, 溝口 理一郎: 「ロール」および「関係」に関する基礎的考察に基づくオントロジー記述環境の開発, 人工知能学会論文誌, Vol. 17, No. 3, pp. 196-208 (2002)

[Kozaki 07] Kozaki, K., Kitamura, Y., and Mizoguchi, R.: Development of Contents Management System Based on Light-Weight Ontology, in *Proc. of the 2007 IAENG International Conference on Internet Computing and Web Services*, pp. 987-992 (2007)

[Masolo 03] Masolo, C., Brogo, S., Gangemi, A., Guarino, N., and Oltamari, A.: WonderWeb Deliverable D18 (2003), Laboratory for Applied Ontology

[Mizoguchi 09] Mizoguchi, R.: YAMATO: Yet Another More Advanced Top-level Ontology (2009), <http://www.ei.sanken.osaka>

*19 ある上位オントロジー (例えば BFO) に基づいたオントロジーを記述する際に、別の上位オントロジー (例えば DOLCE) の性質記述形式で表現されたデータとの関係性を「説明」するために「参照されるもの」として位置づけられるため、上位オントロジーとは別に「参照されるオントロジー」、すなわち「参照オントロジー」と呼んでいる。

u.ac.jp/hozo/ontoLibrary/YAMATO091113.pdf

[中田 07] 中田 正文: エアロゾルボジション法による透明電気光学薄膜, エアロゾル研究, Vol. 22, pp. 20-25 (2007)

[NLM 04] National Library of Medicine (2004), <http://www.nlm.nih.gov/research/umls/>

[OBO 07] The Open Biological and Biomedical Ontologies (2007), <http://www.obofoundry.org/>

[Rector 96] Rector, A., Rogers, J. E., and Pole, P.: The GALEN High Level Ontology, in *Fourteenth International Congress of the European Federation for Medical Informatics, MIE-96, Copenhagen, Denmark* (1996)

[Smith 03] Smith, B., Williams, J., and Schulze-Kremer, S.: The Ontology of the Gene Ontology, in *Proceedings of AMIA Symposium 2003* (2003)

[Spear 06] Spear, D., A.: *Ontology for the Twenty First Century: An Introduction with Recommendations* (2006), <http://www.ifomis.org/bfo/documents/manual.pdf>

[垂見 04] 垂見 晋也, 古崎 晃司, 来村 徳信, 渡邊 英一, 溝口 理一郎: 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, 人工知能学会全国大会論文集 (第 18 回), IG3-02 (2004)

[担当委員: 市瀬 龍太郎]

2008 年 9 月 20 日 受理

著者紹介

垂見 晋也(正会員)



2003 年大阪大学工学部電子情報エネルギー工学科卒業。2005 年同大学院工学研究科電子工学専攻博士前期課程修了, 2009 年同大学院工学研究科電気電子情報工学専攻退学。現在株式会社エネゲートソリューション事業開発室にて, 知識情報処理及びオントロジー開発・応用に関する研究に従事。

古崎 晃司(正会員)



1997 年大阪大学工学部電子工学科卒業, 2002 年同大学院工学研究科博士後期課程修了。同年, 化学工学会嘱託研究員, 同年 12 月大阪大学産業科学研究所助手, 2008 年同准教授, 現在に至る。博士(工学)。オントロジー工学の基礎理論, オントロジー構築・利用環境の設計・開発, セマンティック Web, 医療, 環境分野などのオントロジー開発・応用に関する研究に従事。情報処理学会, 電子情報通信学会, 化学工学会, 各会員。

来村 徳信(正会員)



1993 年大阪大学大学院基礎工学研究科前期課程修了。同年大阪大学産業科学研究所技官, 1994 年同助手, 2003 年同助教授, 2007 年同准教授, 現在に至る。博士(工学)。2007~08 年スタンフォード大学客員准教授。主に物理的システムに関するオントロジー工学の研究に従事。1996 年人工知能学会創立 10 周年記念論文賞受賞。2009 年日本機械学会設計工学・システム設計部門フロンティア業績賞などを受賞。

溝口 理一郎(正会員)



1977 年大阪大学大学院基礎工学研究科博士課程修了。大阪電気通信大学工学部講師, 大阪大学産業科学研究所助手, 助教授を経て 1990 年より教授。工学博士。知識処理全般, 特に知的学習支援システム, オントロジー工学の研究に従事。1985 年 Pattern Recognition Society 論文賞, 1988 年電子情報通信学会論文賞, 1996 年本学会創立 10 周年記念論文賞, 1999 年 ICCE99, 2006 年 ICCE2006 Best Paper Award, 2005 年大川出版賞, 2006 年本学会論文賞受賞。本

学会理事, 同編集委員会委員長, 同会長などを歴任。現在 Semantic Web Science Assoc. Vice-President.