

無機材料分析手法の選択支援のためのオントロジーの構築

砂田 界渡[†] 来村 徳信[‡] 板倉 修一^{††1} 笹本 亮一^{††2} 細井 慎^{††3}

立命館大学大学院 情報理工学研究科[†] 立命館大学 情報理工学部[‡] 株式会社村田製作所^{††1,2,3}

1. はじめに

無機材料の製造において、物質の材質や内部構造の調査のために材料の分析が重要である。共同研究先企業では、分析依頼者は分析依頼書を作成して分析技術者に依頼し、分析技術者はその依頼書をもとに、分析目的に応じた適切な分析手法を選択する必要がある。そこで分析依頼書を与えてテキスト解析し手法を推薦するシステムが提案された。しかしながら、語彙の定義や抽象度が不明瞭であることから、プログラムが複雑になり、メンテナンス性が低下する課題があった。

そこで、本共同研究全体の目標として、分析依頼書の内容から最適な分析手法を推薦するシステムの開発を目指し、本研究ではそのシステムに組み込むことを想定したオントロジーを構築する。本研究は100種類のうち8種類の分析手法を対象とし、分析手法を基本動作・使用媒体などの特性に基づいて定義するオントロジーを構築する。

2. 関連研究

分析手法に関する語彙の定義は様々な分野で行われている。放射線分野では放射線科領域に特化した用語集 RadLex[1]、医学分野では医学用語を統一的にまとめた用語集 SNOMED-CT[2]が開発されており、これらで定義されている用語は is-a 関係で整理された階層構造を為している。例えば RadLex では、用語としての各分析手法は“Imaging Specialty(画像に関する専門技術)”-“Imaging Modality(画像診断法)”の下位概念で定義されており、“Computed Tomography(CT 法)”や“Spectroscopy(分光法)”などが定義されている。

上記の用語集は統一された語の提供を行うが、手法の一般的な定義に加えて、「どの媒体を使用するのか」、「何を分析することができるのか」、「どのような分析結果が得られるのか」などの経験者が

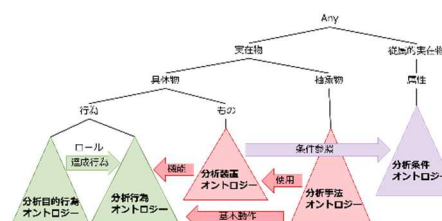


図1 オントロジーの全体像

知り得る手法の特徴も重要である[3]。そのため、本研究では、上記の特徴を含めて分析手法を体系的に定義する。

3. 分析目的に関するオントロジー

本研究で構築する主な上位概念として分析目的行為、分析行為、分析手法、分析装置がある。これら4つの概念は、分析手法の提案にあたって、「分析依頼書に記載されている分析目的行為を達成するための部分行為(分析行為)を満たす分析手法を抽出し、その手法が用いる分析装置の条件が依頼に合致するかを確かめ、合致している装置(最適な分析装置)を用いる手法を最適な分析手法とする」という関係性がある。(図1)

これら4つの概念の内、本節では、分析行為と分析目的行為を説明する。分析行為は、これ以上部分行為に分解できない原子行為を指し、「観察する」と「測定する」と「加工する」の3つに大別した。主に、何を分析するのかを表す「対象入力物」スロットと、どのような分析結果が得られるのかを表す「対象出力物」スロットを定義した。(図3)

分析目的行為は、分析依頼書に記述されている分析目的に関する行為を指し、図3の分析目的行為の「達成方式」スロットに示すように、1つ以上の達成方式[4]にもとづいて、「分析行為 | 分析目的行為」(「|」はOR関係を表す)をクラス制約とする複数の部分行為によって達成される行為である。このように達成方式スロットを用いて記述することで、分析目的行為(全体行為)と分析行為(部分行為)の関係性を明示的に表現した。従来の RadLex[1]、SNOMED-CT[2]では、この関係性の一部は is-a 関係と明確に区別されていないという問題点があった。

4. 分析手法に関するオントロジー

分析装置は主に、「分析行為」をクラス制約とする「機能」と、「属性」をクラス制約とする「解

Building an ontology to support the selection of inorganic material analysis methods

[†] Kaito Sunada, Graduate School of Information Science and Engineering, Ritsumeikan University

[‡] Yoshinobu Kitamura, College of Information Science and Engineering, Ritsumeikan University

^{††1} Shuichi Itakura, Murata Manufacturing Co., Ltd.

^{††2} Ryoichi Sasamoto, Murata Manufacturing Co., Ltd.

^{††3} Shizuka Hosoi, Murata Manufacturing Co., Ltd.

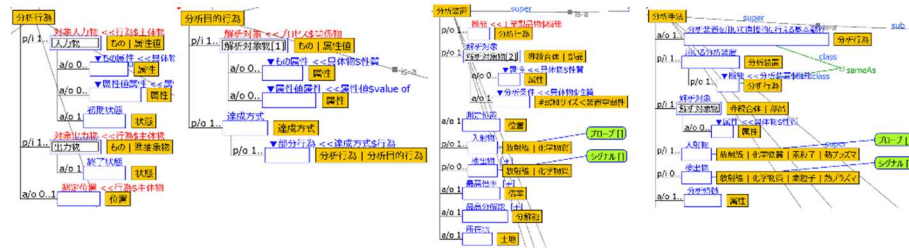


図3 各オントロジーの上位概念(分析行為, 分析目的行為, 分析装置, 分析手法)

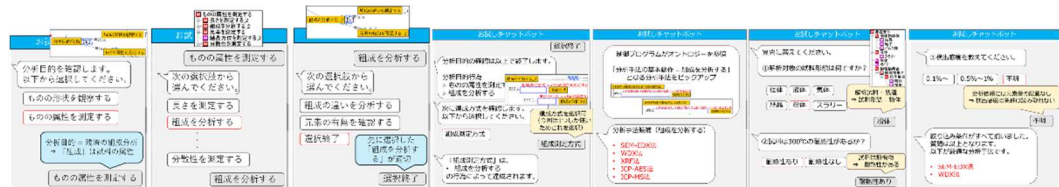


図2 推薦システムの利用手順

析対象」スロット内の「属性」をスロットに持つ(図3)。「属性」スロットは分析条件を参照することで、装置が持つ具体的な分析条件を表現できる。

分析手法は主に、「分析行為」をクラス制約とする「分析装置を用いて直接的に行える基本動作」, 「分析装置」をクラス制約とする「用いる分析装置」, 主に「放射線」をクラス制約とする「入射物」・「検出物」をスロットに持つ(図3)。分析手法は入射物にX線を利用する「X線利用手法」と電子線を利用する「電子線利用手法」の2つに大別した。

5. オントロジーの利用例

本節では、企業が開発した推薦システムについて述べる。「残渣の組成にどのような元素が含まれているかを確認したい。」という依頼例をもとに、図2に示す推薦システムの利用手順を述べる。

起動後、分析目的の選択肢が表示されるので、依頼に合致するものを選択する。選択肢として表示されるものはすべてオントロジーで定義された概念である。今回は残渣の組成確認なので、「ものの属性を測定する」・「組成を分析する」を選択する。

次に、達成方式と部分行為を確定させる。オントロジーで定義された「組成を分析する」の達成方式スロットが参照され、選択肢に「組成測定方式」が表示される。これを選択すると、「組成を分析する」の部分行為サブスロットが参照され、部分行為が表示される。その後、制御プログラムが「分析手法の基本動作=組成を分析する」となる分析手法をピックアップし、その結果を表示する。

次に、複数の質問によって、適切な手法を絞り込む。システムから解析対象の試料形態が何であるかという質問と選択肢が表示される。依頼書には試料は残渣と書かれていることから試料形態は粉体であることが読み取れるため、「粉体」を選択する。次に試料は300℃の耐熱性があるかの質問が表示され

る。試料は無機物であり耐熱性のある試料であると読み取れるため「耐熱性あり」を選択する。次に、検出感度の質問が表示されるが、依頼書には元素量の記載はなく検出感度の条件は読み取れないため、「不明」を選択する。このようなすべての条件に基づいて絞り込みが行われ、システムは分析手法に「SEM-EDX法」と「WDX法」を表示し、ユーザに2つの分析手法を提案する。この2つの手法を提案するのは正しい動作である。

6. まとめ

本研究では、最適な分析手法を推薦するための概念を定義し、推薦システムとしての利用方法を提案した。また、本稿では述べるができなかったが、オントロジーとシステムの評価を行った。

今後は、加工行為に関する概念を拡充するのに加えて、オントロジーの登録作業を行う予定である。

謝辞

本研究はJSPS 科研費 23K21730 の助成を受けたものである。

参考文献

- [1] Langloz CP.: RadLex: a new method for indexing online educational materials. Proceeding of Radiographics, Vol.26, No.6, pp.1595-1597 (2006).
- [2] <https://browser.ihtsdotools.org/>
- [3] 福田晋久, 辻真太郎, 谷川原綾子, 西本尚樹, 小笠原克彦: 放射線技術分野への応用に向けたオントロジーの分類, 日本放射線技術学科雑誌, 71巻, 6号, pp.505-511 (2015).
- [4] 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, 人工知能学会論文誌, 17巻, 1号, pp.61-72 (2002).