

2024 年度

修 士 論 文

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とその利用

指導教員：村上 陽平

立命館大学大学院 情報理工学研究科
情報理工学専攻 博士課程前期課程
計算機科学コース

学生証番号：6611230033-4

氏名：砂田 界渡

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とその利用

砂田 界渡

内容梗概

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。分析に際し、依頼者は依頼書を作成して技術者に依頼する。技術者は、その依頼書をもとに、依頼者と相談会を行い、分析目的に応じた最適な手法を選択する必要がある。例えば、材料内の空洞(ボイド)の有無の調査が分析目的の場合、「X 線 CT 法」が原理的な候補となる。しかしながら、実際には分析手法の特徴や条件も総合的に判断する必要があるため、経験の浅い技術者には困難な場合がある。このような問題に対し、共同研究当初において、依頼書を与えてテキスト解析し分析手法を推薦するシステムが提案されたが、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、依頼書の内容から最適な手法を推薦する、チャットボット方式の推薦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オントロジーを構築する。

本手法の実現のために、本研究で取り組んだ課題は以下の通りである。

分析依頼目的・分析手法・分析条件に関するオントロジーの構築

分析目的から最適な分析手法を推薦するにあたり、分析手法の定義に分析目的を直接参照する形で、分析目的と分析手法を一対一対応で記述してしまうと、分析目的の数だけ分析手法に新たな定義が必要となり、オントロジーが煩雑化する。そのため、記述量が膨張しないように概念を再利用して定義する必要がある。さらに、分析に関する特徴や条件を考慮する必要があるため、分析目的と分析手法に加えて分析手法の分析特徴や分析装置の分析条件などの概念も含めて、体系的に概念を定義する必要がある。

推薦システム開発のための指針となる語彙と利用プロセスの構築

オントロジーをシステムに組み込むにあたり、上記の 3 つのオントロジーを用いて、分析目的が与えられたときに分析手法の特徴や条件を結び付けて、最適な手法を推薦することができるプロセスを考察する必要がある。オントロジーによって抽象概念に集約し、構造化するとともに、その利用プロセスを考察し、推薦システムを開発するための指針を提供することを目指す。

第1の課題のために、各分析手法の詳細が掲載された分析手法カタログ、共同研究先企業から提供された分析手法一覧ファイル、過去の分析事例に関するファイルを知識源として、1)分析依頼目的に関するオントロジー、2)分析手法に関するオントロジー、3)分析条件に関するオントロジーを構築した。構築したオントロジーの要素数はクラス数が 533 個、スロット数が 1,192 個である。このとき、「分析手法」に、「分析行為」をクラス制約とし、汎用的な分析内容を指す「基本動作」スロットを定義した。また、分析目的が、複数の分析行為の列で構成される複数の達成方式により達成される目的—達成関係を明示的に定義した。これにより、多く存在する分析手法の定義において、直接的に分析目的を参照することなく汎用的な分析行為を再利用できるため、手法によって明らかにできる分析目的が増えるごとに分析手法に新たなスロットを定義する必要がなくなり、記述量の爆発の課題を解決した。

第2の課題のために、上記の3つのオントロジーの利用プロセスを考察した。このプロセスは汎用的に扱えるものであり、本オントロジーとプロセスを指針として、簡易推薦システムを筆者が実装するとともに、本格的な推薦システムが共同研究先企業によって開発・評価された。オントロジーの利用プロセスは次の通りである。まず、分析依頼から該当する「分析目的行為」を参照し、「部分行為」サブスロットを抽出する。次に、抽出した部分行為を「基本動作」に持つ「分析手法」を選択する。その後、「分析手法」の「分析特徴」スロットや「分析装置」の「分析条件」スロットに基づいて、分析に必要な条件を満たすことを確認し、それらをすべて満たした分析手法を最適な分析手法として出力する。

本研究の貢献は以下の通りである。

分析依頼目的・分析手法・分析条件に関するオントロジーの構築

上記の3つのオントロジーを構築した。また、分析手法に「基本動作」スロットを定義したことで、分析目的と分析手法を一対一対応で記述する方式と比べ、分析手法に関するクラス数とスロット数の合計記述量を 55%削減でき、記述量の爆発の課題を解決した。

語彙と利用プロセスの考察による推薦システム開発への貢献

抽象概念の体系的な定義により、分析目的が与えられたとき分析手法の特徴や条件を結び付けて、最適な手法を推薦するプロセスを考察することができ、オントロジーを組み込んだ推薦システムの開発指針を提供した。

An ontology to support the selection of inorganic material analysis methods and its use

Kaito Sunada

Abstract

In the manufacture of inorganic materials, analysis is crucial for investigating material properties and internal structures. The clients submit an analysis request form to the engineers, who then hold consultation meetings to select suitable methods. For example, the "X-ray CT method" is fundamentally used to detect voids in materials. However, inexperienced engineers often face challenges in identifying the optimal one. Therefore, the collaborative research partner company proposed a system to analyze texts and recommend a method by giving an analysis request. However, because the definitions and abstraction of vocabulary are unclear, the program becomes complicated, and maintainability is lowered.

To address this, this research aims to develop a chatbot recommendation system that suggests the best analysis method based on interaction. This research focuses on building an ontology for the system.

The contributions of this study are as follows:

Building of an ontology related to analysis purpose, analysis method, and analysis condition

To recommend the optimal analytical methods for specific purposes, directly linking each method to purposes leads to unnecessary complexity and an increase in definitions. To avoid this, reusable concepts must be defined systematically, incorporating not only analysis purposes and methods but also characteristics and conditions.

Building a vocabulary and usage process that will serve as a guideline for recommendation system development

To incorporate ontologies into the system, it is necessary to consider the process which can recommend the most suitable method by combining features and conditions of analytical methods when the purpose of analysis is given using the above three ontologies.

To address the first issue, the following ontologies are built by using analysis

catalogs, a method list from the partner company, and past analysis cases: ontologies for 1) analysis purposes, 2) analysis methods, 3) analysis conditions. The ontology has 533 classes and 1,192 slots. At this time, this study defined a “Basic action” slot for “Analysis method” with “Analysis act” as a class constraint, along with a goal-achievement relationship where the analysis purpose is achieved through multiple methods comprising various analysis acts. This approach enables the reuse of general analysis acts without directly linking them to specific purposes, avoiding the need to define new slots for each new purpose and preventing a proliferation of descriptions.

For the second issue, the utilization process of the above three ontologies is considered. This process is general-purpose, and based on this ontology and process, the author implemented a simple recommendation system, and a full-scale recommendation system was developed and evaluated by a collaborative research partner company. The utilization process of the ontology is as follows. First, from the analysis request, the corresponding "Analysis target action" is referenced, and the "Partial action" sub-slot is extracted. Next, the "Analysis method" that has the extracted partial act as the "Basic action" is selected. Then, based on the "Analysis feature" slot of "Analysis method" and the "Analysis condition" slot of "Analysis device," it is confirmed that the conditions required for analysis are satisfied, and the analysis method that satisfies all the conditions is output as the optimum analysis method. The contributions are as follows.

Building of ontologies related to analysis request purposes, analysis methods, and analysis conditions

The three ontologies were built, and defining "Basic action" slot for analysis methods reduced related classes and slots by 55%, solving the problem of description overload.

Building a vocabulary and usage process that will serve as a guideline for recommendation system development

Systematically defining abstract concepts enables linking features and conditions of analytical methods to recommend the optimal method for a given purpose, providing guidelines for developing an ontology-based recommendation system.

目次

第 1 章 はじめに	1
第 2 章 背景知識	4
2.1 法造	4
2.2 達成方式	5
2.3 表現	6
2.4 RDF	7
第 3 章 分析依頼目的に関するオントロジーの構築	8
3.1 オントロジー構築の概要	8
3.2 分析行為オントロジー	10
3.2.1 「観察する」の下位概念	11
3.2.2 「測定する」の下位概念	13
3.2.3 「加工する」の下位概念	16
3.3 分析目的行為のオントロジー	17
3.3.1 「ものの形状を観察する」の下位概念	18
3.3.2 「ものの属性を測定する」の下位概念	18
3.4 分析目的行為と部分行為(分析行為)が同じ名前になるケース	20
第 4 章 分析手法に関するオントロジーの構築	21
4.1 分析装置オントロジー	21
4.2 分析手法に関するオントロジー	27
第 5 章 分析条件に関するオントロジーの構築	30
5.1 分析条件オントロジー	30
5.2 解析状況依存属性	30
5.3 解析対象物自身を持つ属性	33
第 6 章 オントロジーを利用した推薦	34
6.1 推薦プロセス	34
6.2 簡易的な推薦プログラムの実装	36
第 7 章 推薦システムの実装と評価	41
7.1 推薦システムの説明	41

7.2 推薦システムの利用手順.....	42
7.3 オントロジーとシステムの評価	44
7.4 評価結果の考察.....	46
7.5 今後の展望	47
第 8 章 関連研究と考察	48
8.1 本研究で構築したオントロジーの考察.....	48
8.2 オントロジーを用いた推薦システム	48
8.2.1 他分野における推薦オントロジー.....	48
8.2.2 オントロジーを用いたチャットボットシステムの開発.....	49
8.3 他分野における分析手法の定義	50
8.3.1 RadLex.....	50
8.3.2 SNOMED-CT.....	50
8.3.3 Measurement Method Ontology (MMO).....	51
8.3.4 The Chemical Method Ontology (CHMO)	52
8.3.5 The Chemical Analysis Metadata Platform (ChAMP)	53
8.4 共同研究で開発された推薦システムの位置づけと特徴.....	54
第 9 章 おわりに	55
謝辞	56
参考文献	58
付録 オントロジーの全体像	61

第1章 はじめに

本研究は民間企業との共同研究の一部として、無機材料の分析を対象としている。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と同時に、具体的な分析目的は多様である。材料を分析するにあたり、依頼者は依頼書を作成して技術者に依頼する。技術者は、その依頼書をもとに、依頼者と分析相談会を行い、分析の依頼目的に応じた適切な分析手法を選択する必要がある。例えば、材料内の空洞(ボイド)の有無の調査が依頼目的であれば、「X 線 CT 法」という分析手法が原理的な候補となる。しかしながら、分析に必要な条件や特性は明示的に記述されているとは限らず、分析相談会で依頼者とインタラクションすることで情報を獲得する必要がある場合もあり、最適な分析手法を選択することは非常に高度な行為である。上述の例で、ボイドの有無の調査が依頼目的の場合、「X 線 CT 法」は最適な手法の候補になり得るが、X 線 CT 法は一部材質を X 線照射により変色させてしまう特徴があるため、物質を変色させずに分析する必要がある際は X 線 CT 法が使えず、「走査電子顕微鏡法」を選択する必要がある場合もある。そのため、数ある分析手法の中から最適な分析手法を選択することは、無機材料や X 線・赤外線といった使用媒体などの特性や依頼された調査目的、その分析手法によって明らかにできる性質などに基づいて総合的に判断する必要があるため、経験の浅い技術者には困難な場合がある。このような問題に対し、共同研究当初において、依頼書を与えてテキスト解析し分析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。加えて、依頼書内では省略され明示的には書かれない語彙があるため、定義の量や実装するプログラム数が膨大になる課題があった。

そこで、依頼書の内容から最適な手法を推薦する、チャットボット方式の推薦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オントロジーを構築する。具体的には、主に分析目的・分析手法・分析条件に関するオントロジーを構築し、特に分析目的と分析手法の間に中間層として分析行為を定義することで、分析手法の定義の再利用性を高める。

分析の分類は観察・物性・組成・構造・化学構造・その他の 6 つとしているが、本研究で構築したオントロジーは、この分類のうち観察・組成分析を対象領

域としている。本研究で対象とする分析手法は、観察手法(走査電子顕微鏡法(SEM (Scanning Electron Microscope) 法), 電解放射-走査電子顕微鏡法(FE-SEM (Field Emission-Scanning Electron Microscope) 法), 後方散乱電子回析法(EBSP(Electron BackScattering Pattern) 法), 帯電噴霧 SEM 法, X 線 CT 法)と組成分析手法(エネルギー分散型 X 線分析法(EDX (Energy Dispersive X-ray spectrometry) 法), 波長分散型蛍光 X 線分析法(WDX(Wavelength-Dispersive X-ray spectrometry)法), 蛍光 X 線分析法(XRF(X-ray Fluorescence analysis)法))の計 8 つの手法に絞っている。

本手法の実現にあたり, 取り組むべき課題は以下の通りである。

分析依頼目的・分析手法・分析条件に関するオントロジーの構築

分析目的から最適な分析手法を推薦するにあたり, 分析手法の定義に分析目的を直接参照する形で, 分析目的と分析手法を一対一対応で記述してしまうと, 分析目的の数だけ分析手法に新たな定義が必要となり, オントロジーが煩雑化する。そのため, 記述量が膨張しないように概念を再利用して定義できる必要がある。さらに, 分析に関する特徴や条件を考慮する必要があるため, 分析目的と分析手法に加えて分析特徴や分析条件などの概念も含めて, 体系的に概念を定義する必要がある。

推薦システム開発のための指針となる語彙と利用プロセスの構築

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にあたり, 上記の 3 つのオントロジーを結び付ける必要がある。具体的には, 分析目的が与えられたとき分析手法の特徴や条件を結び付けて, 最適な手法を推薦することができるプロセスを考察する必要がある。オントロジーによって抽象概念に集約し, 構造化するとともに, その利用プロセスを考察し, 推薦システムを開発するための指針を提供することを目指す。

本研究の研究項目は大きく 4 つに分かれる。第 1 の研究項目は分析依頼目的に関するオントロジーの構築であり, 「分析行為」と「分析目的行為」を定義する。全体行為(分析目的行為)とその部分行為(分析行為)を, 第 2 章で述べる「達成方式」概念に基づいて記述し, 分析目的行為と分析行為の関係性を明示化する。第 2 の研究項目は分析手法に関するオントロジーの構築であり, 「分析装置」と「分析手法」を定義する。「分析手法」に「分析行為」をクラス制約とした「基本動作」スロットを定義し, その手法が行う内容を表現する。また, 最適な分析手法を選択する際, その手法が用いる装置の使用条件を考慮する必要があり, こ

れを「分析装置」に「分析条件」スロットを定義することで表現する。このスロットは第 3 の研究項目である分析条件に関するオントロジーを直接参照する形で定義する。最後に構築したオントロジーの利用について考察し、分析目的が与えられたとき分析手法の特性を結びつけて、最適な分析手法を推薦するプロセスを構築する。本研究はオントロジーの構築が目的であり、本オントロジーとプロセスを指針として共同研究先企業が推薦システムを開発・評価する。

以下に本論文の章構成を示す。第 2 章では、背景知識として、本研究で使用するツールの「法造」、本研究の基盤となる先行研究である「達成方式」概念、「表現」のオントロジー、構築したオントロジーの利用イメージを簡易的に実現する際に使用した「RDF」について述べる。第 3 章では、第 1 の研究項目である分析依頼目的に関するオントロジーに関して、「分析行為」と「分析目的行為」について述べる。第 4 章では、第 2 の研究項目である分析手法に関するオントロジーに関して、「分析装置」と「分析手法」について述べる。第 5 章では、第 3 の研究項目である分析条件に関するオントロジーに関して、「解析状況依存属性」と「解析対象物自身が持つ属性」について述べる。第 6 章では、オントロジーの利用イメージの考察とその簡易的な実現について述べる。第 7 章では、共同研究先企業が開発した推薦システムとオントロジーとシステムの評価を述べる。第 8 章では、関連研究と本研究の比較について述べる。第 9 章では、本研究のまとめと今後の課題について述べる。

第2章 背景知識

2.1 法造

法造¹とは、概念を体系的に定義し、オントロジーを構築するためのオントロジエディタ[1]である。具体例として、図 2.1 に二輪車のオントロジーを示す（全体像は文献[2]を参照していただきたい）。二輪車には、前輪、後輪、フレーム、ハンドル、かごといった部品があり、それらが「二輪車」クラスにスロットとして追加されている。そして、二輪車と各部品の間に **part-of** 関係が成り立っており、それを略した「p/o」が表記されている。二輪車には前輪と後輪という車輪が必ずあり、前の車輪が前輪としての役割を果たしている。このように役割を示す概念のことをロール概念という。前輪の役割を担うのは車輪なので、前輪では「車輪」がクラス制約として記述されている。前輪は二輪車に 1 つしかないので、「p/o」の右横に個数制約として「1」が記述されている。

さらに、二輪車はスタンド無しには自立しないという特性がある。つまり、自立性の属性値が **false** であるといえるので、二輪車と自立性の間には **attribute-of** 関係が成り立ち、それを略した「a/o」が表記されている。

また、二輪車は自転車と自動二輪車に分類される。これらの区別は、動力源が「人間」か「エンジン」かの違いである。自転車と自動二輪車はそれぞれ二輪車を特殊化したものなので、**is-a** 関係が成り立ち、上位概念である二輪車のスロットが継承される。

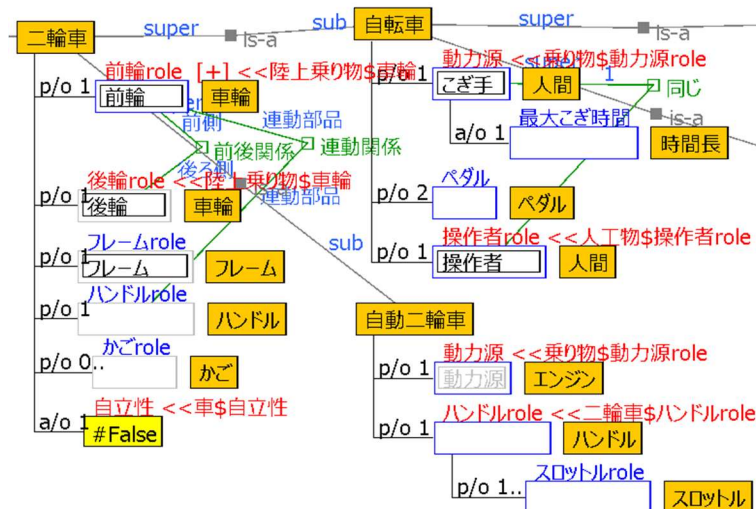


図 2.1 二輪車のオントロジー

¹ http://www.hozo.jp/index_jp.html

その他に、2つの概念の関係性に対して、部分でも属性でもなく、参加(関与)しているといえる関係のことを **participate-in** 関係といい、「p/i」と略す。例えば、「カレーを作る」と「野菜」の関係性がこれに該当する。「野菜」は「カレーを作る」行為の部分でも属性でもなく、野菜を切る工程や炒める工程で関与しているものである。従って、「カレーを作る」と「野菜」の間に **participate-in** 関係が成り立っているといえる。

本研究では、法造エディタを使用し、クラス概念とロール概念をもとに、分析目的から分析手法を推薦するオントロジーを構築する。

2.2 達成方式

達成方式とは、目的の行為をどのように達成するかを表す概念であり[3]、図 2.2 の左下のように「行為」をクラス制約とする「部分行為」を持つ。また、左上のように「行為」クラスは「達成方式」スロットを持つと定義できる。このとき、「行為」クラス内の「達成方式」スロットは論理和の関係があり、「達成方式」スロット内の「部分行為」サブスロットは論理積の関係がある。例えば「学校に行く」という行為を目的として達成したい場合、達成方式として「徒歩方式」と「自転車方式」と「バス方式」がある。その中の「自転車方式」の場合、部分行為の「自転車に乗る」と「自転車を漕ぐ」を実行することで、学校に行くという目的が達成される。達成方式をこのように定義することにより、目的の行為を達成するには、特定の達成方式の部分行為を行うことで目的の行為を達成できると表現することができる。

この達成方式と部分行為という概念は、第 3 章で述べる分析目的行為と分析

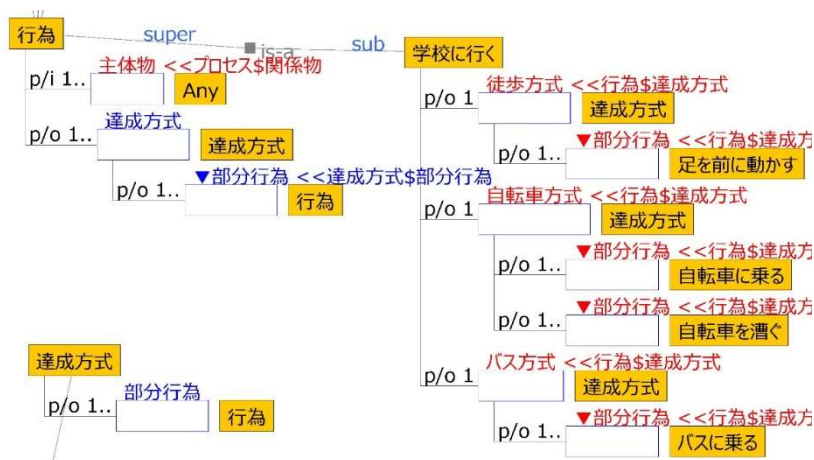


図 2.2 「達成方式」と「学校に行く」の定義

行為の定義に用いる．分析目的行為(全体行為)は複数の分析に関する原子行為(分析行為)に分解することができ，この全体行為—部分行為に関する表現を，達成方式と部分行為の概念を用いて定義する．例えば，「ボイドを観察する」という分析目的行為は，1)「内部を観察する」という分析行為を行う，あるいは，2)「断面を出す」という分析行為の後に「表面を観察する」という分析行為を行うことで達成できる．これを達成方式と部分行為の概念を用いて，1)「内部を観察する」を部分行為とする「内部直接観察方式」，2)「断面を出す」と「表面を観察する」を部分行為とする「断面出し方式」，のように定義し，「ボイドを観察する」には「内部直接観察方式」または「断面出し方式」を選択し，その方式内の部分行為を行うことで達成できるということを表現する．

2.3 表現

表現とは，表現したい内容とそれをどのような表現形態で表現するかを表す概念である[4]．図 2.3 (左)に定義を示すように，「表現」は「表現形態」をクラス制約とする「形態」と，「命題」をクラス制約とする「内容」を **part-of** として持つ．表現形態とは，画像，文字，グラフのような表現を実現する表現媒体に対応するものを指す．命題とは，実世界に生起するあらゆる事象を人が認識した結果を陳述したものの内容[4]を指し，例えば，図の内容，文字の内容，講義の内容などがこれに該当する．表現をこのように定義することで，その表現はどのような表現形態を使用して，どのような内容を表現しているのか，を表すことができる．

この表現という概念は，第 3 章で述べる分析行為の分析結果に関する定義に用いる．分析行為として例えば「組成を分析する」という行為を行うと，結果として分析した試料に含まれる元素の量が線グラフで表示される．このとき，表現形態と表現内容という概念を用いることで，線グラフという表現形態を使用して，その試料に含まれる元素量という表現内容を表示する行為として定義する．この表現という概念を用いて分析結果を定義することで，分析結果を表現形態



図 2.3 「表現」と「図」の定義

と表現内容に分けて表現できるため、各分析行為の差異を分析結果の表現形態でも明示的に記述することができ、新しい分析行為を定義する際に表現内容が同一であっても、分析結果の表現形態の定義をもって分析行為の差異を記述することができる。

2.4 RDF

Resource Description Framework (RDF)¹とは、Web 技術を使ってデータを記述するためのフレームワークである[5]。RDF 形式のデータは、図 2.4 のようにトリプルと呼ばれる、主語、述語、目的語の 3 つ組で記述される。この例では、「小説『〇〇』の著者は A さんである」ということを表現しているが、これを RDF 形式で表現すると、1)主語：小説『〇〇』、2)述語：著者、3)目的語：A さん、のようになる。RDF 形式のデータにすることの利点として The SPARQL Protocol and RDF Query Language (SPARQL)²というクエリ言語が使えるということが挙げられる。SPARQL とは RDF データのために設計されたクエリ言語であり、これを用いることで RDF データの抽出やクエリ検索が可能になる。

この RDF と SPARQL は、第 6 章で述べるオントロジーを組み込んだ簡易的な分析手法推薦システムの開発時に使用する。具体的には、Slack アプリ開発の公式フレームワークである Bolt³を利用し、ユーザが入力した分析目的を満たす最適な分析手法と分析装置を提示するような簡易的チャットボットを実装する。構築したオントロジーデータを RDF に変換し、SPARQL を用いてクエリに合致するデータを抽出する。このとき、rdflib ライブラリを利用することで、SPARQL を用いて RDF データを操作(抽出、クエリ検索)する。

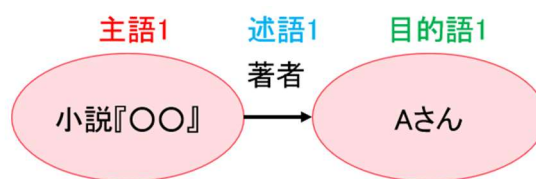


図 2.4 小説本と著者情報のトリプル

¹ <https://www.w3.org/TR/2024/WD-rdf12-concepts-20241024/>

² <http://www.w3.org/TR/2013/REC-sparql11-query-20130321/>

³ https://tools.slack.dev/bolt-python/api-docs/slack_bolt/

第3章 分析依頼目的に関するオントロジーの構築

3.1 オントロジー構築の概要

本研究では、分析手法推薦システムに組み込まれることを想定したオントロジーを構築することを目標として、「法造」を用いてオントロジーを構築した。本研究で構築したオントロジーは上位オントロジーYAMATO¹[6]に準拠しており、それを一部簡略したものになっている。その理由は、行為の分解関係を「達成方式」という概念を用いて明示的に記述する方法を提供していることと、情報の表現物を「表現内容」と「表現形態」に明確に区別して表現できる[4]からである。

本研究では、分析目的に応じた最適な分析手法を推薦するためのオントロジーを構築するにあたって、以下のような課題の解決を目指した。

第1の課題は、分析に関わる語彙定義や抽象度が不明確なことである。この課題はプログラムを複雑にし、メンテナンス性を低下させる原因となる。

第2の課題は、分析手法の定義に分析目的を直接記述すると、記述量が増えスケールが大きくなってしまうという問題である。例えば、走査電子顕微鏡法 (SEM (Scanning Electron Microscope) 法) の分析目的としては、「表面の形状を分析可能」、「ボイドの有無を分析可能」、「めっきの剥がれの確認可能」などが考えられる。各分析手法の定義に考えられる分析目的を直接記述してしまうと記述量が非常に多くなり、オントロジーが煩雑化する。そのため、分析手法が汎用的にできること（後述のように「分析行為」と呼ぶ）をオントロジカルに列挙し、その分析行為を中間概念として用いて分析手法を定義することにより、定義のスケールをなるべく大きくしないよう概念を再利用して定義する必要がある。

第3の課題は、最適な分析手法を推薦するにあたって、分析装置の持つ分析条件を考慮する必要があることである。例えば、走査電子顕微鏡という分析装置は試料を真空空間に置くため「試料は真空空間に置いても壊れないものである」という使用条件があり、「試料中に含まれるボイドの確認」といった分析目的に対して、解析試料が真空空間に置かれると壊れてしまう性質がある場合、解析試料が走査電子顕微鏡の使用条件を満たしていないので、走査電子顕微鏡を使用す

¹ YAMATO: Yet Another More Advanced Top-level Ontology,
http://download.hozo.jp/onto_library/upperOnto.htm.

る分析手法は適切ではない，ということになる．従って，適切な分析手法を推薦するために，分析装置の使用条件を定義する必要がある．

オントロジーの知識源として，各分析手法の詳細が紹介された書籍[7]，共同研究先から提供された分析手法一覧ファイル，過去の分析事例に関するファイルを用いた．分析手法一覧ファイルは，約 **100** 種類の分析手法に対して，「観察する」，「測定する」，「加工する」のどの分析行為ができるか，その分析手法で分析できる物質の試料形態（個体，粉体，液体など），分析で使用する媒体などが記載されている．過去の分析事例に関するファイルは，分析依頼書とその分析依頼に対して実際に選択された分析手法などが記載されている．

本論文では分析に関する **3** つの基本行為（「観察する」と「測定する」と「加工する」），その下位概念と分析目的との関係性，装置の機能や制約に関わる基本的概念を定義するための枠組みに焦点を当てて説明する．構築したオントロジーの要素数はクラス数が **533** 個，スロット数が **1,192** 個である．

本研究で構築する主な上位概念として，図 3.1 に示すように，分析目的行為，分析行為，分析手法，分析装置，分析条件がある．分析目的から分析手法を推薦するにあたって，これら **5** つの概念は「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分析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．

本章では分析目的に関するオントロジーについて，「分析行為」と「分析目的行為」の **2** つの概念を述べ，4 章で分析手法に関するオントロジーについて，「分

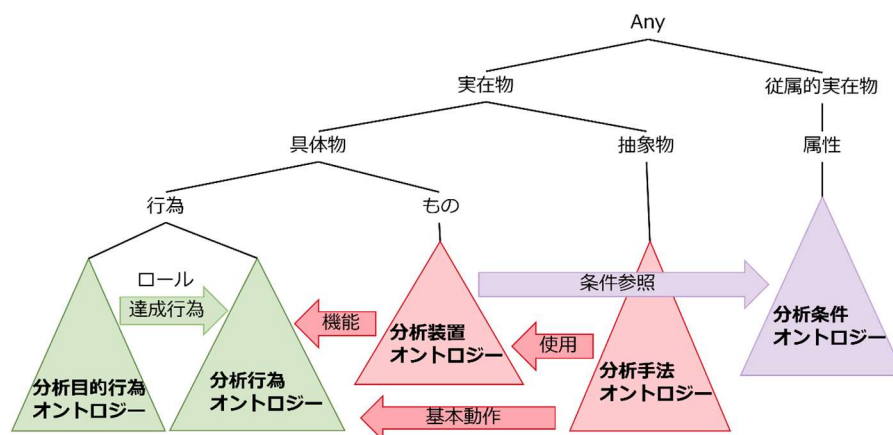


図 3.1 オントロジーの全体像

析装置」と「分析手法」の 2 つの概念を述べ、5 章で分析条件に関するオントロジーを述べる。

3.2 分析行為オントロジー

分析行為の定義について説明する。分析行為は、分析に関する基本的な行為を指し、図 3.2 のように「観察する」と「測定する」と「加工する」と分析行為の内容に基づいて 3 つに大別した。まず、「分析行為」のスロットとして、何を分析するかという入力物を表す「対象入力物」スロットを定義した。「観察する」場合の対象入力物には、実際に観察する解析試料などが入るので、図 3.2 の左下に示す 1 つ目の下位クラスである「観察する」行為の定義において、「対象入力物」スロットのクラス制約を「もの」と記述した。一方、右下に示す 2 つ目の下位クラスである「測定する」行為では、対象入力物は「観察する」と同様に解析試料などもあれば、後述する「割合を測定する」のように、ものの「属性」を

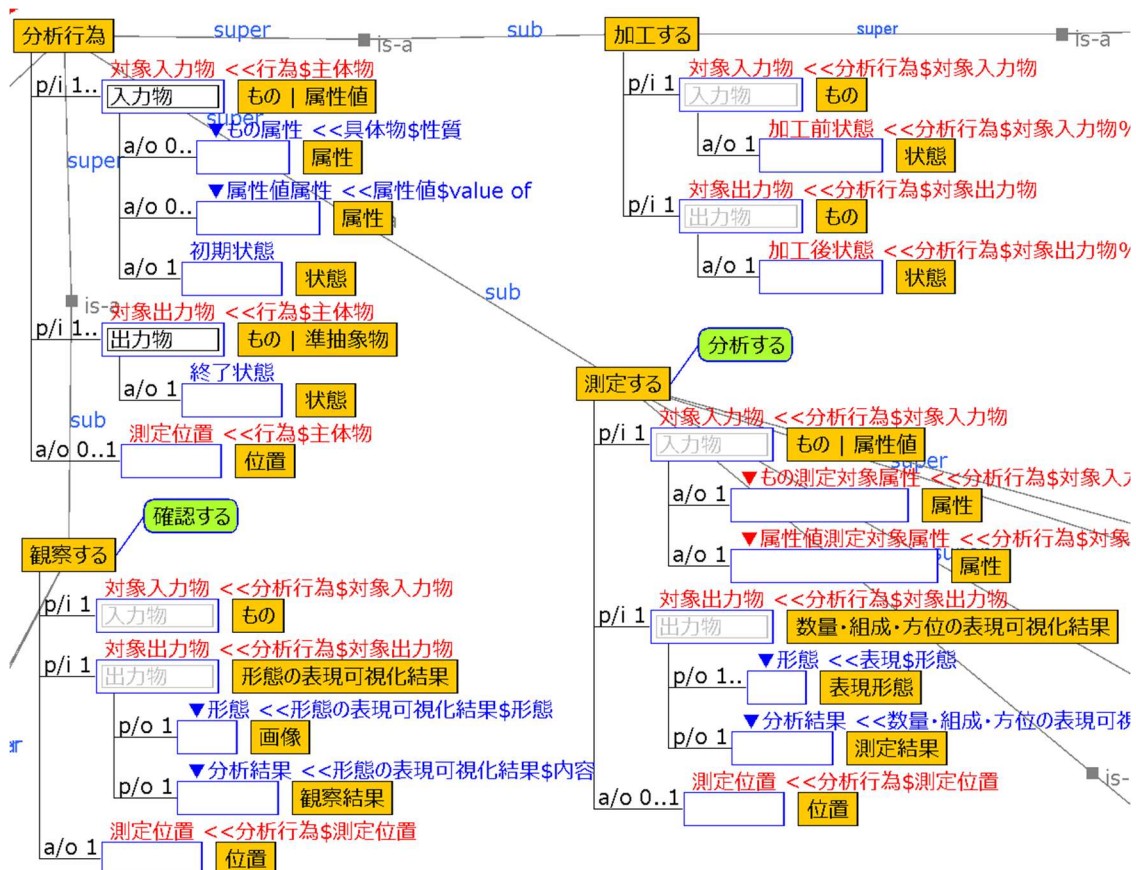


図 3.2 「分析行為」の下位概念

対象入力物とする場合もあるので、クラス制約を「もの | 属性」¹と記述した。一般に測定とは、ものの属性を測定することであり、例えば、「ものの長さを測定する」場合、解析対象物は「もの」であるが、測定対象は「長さ」という属性である。これを表現するために、「測定する」の「対象入力物」スロットのサブスロットにクラス制約を「属性」とする「測定対象属性」スロットを記述した。

次に、「分析行為」のスロットとして、その分析行為を行うことで何を得られるかを表す「対象出力物」スロットを定義した。「観察する」行為を行うと、試料の形状画像が観察結果として出力されるので、それを表現する「形態の表現可視化結果」をクラス制約に記述した。「測定する」行為を行うと、長さを測定した場合は長さの測定結果を表す「5cm」などが出力されたり、割合を測定した場合は割合の測定結果を表す「5%」などが出力されたりする。対象出力物は解析物のどの属性を測定するかによって異なるので、これを表現するために「数量・組成・方位の表現可視化結果」をクラス制約に記述し、そのサブスロットにどの「表現形態」の、どのような「測定結果」が得られるかを記述した。

さらに、「対象入力物」の試料のどの部分を分析するのかを表す「測定位置」スロットを定義した。測定位置は「表面」、「裏面」、「内部」の3つがあり、例えば「内部を観察する」場合は測定位置が「内部」、「長さを測定する」場合は測定位置が「表面」または「裏面」となる。

図 3.2 の右上に示す、「分析行為」の3つ目の下位概念である「加工する」という概念は、加工前の状態の物質を何らかの加工をすることで加工後の状態にすることであるので、「対象入力物」スロットに加工前の物質を、「対象出力物」に加工後の物質を表現する必要がある。そのため、それぞれクラス制約を「もの」と記述し、そのサブスロットに「加工前状態」スロット、「加工後状態」スロットを記述した。

これらの3つの下位概念の上位クラスとして、「分析行為」は定義されている。例えば「対象入力物」のクラス制約は、「測定する」が「属性」を対象入力物とする場合があるため、それを含むように「もの | 属性」と定義されている。

3.2.1 「観察する」の下位概念

「観察する」の下位概念には、図 3.3 のように「表面・裏面を観察する」と「内

¹ クラス制約の「|」は論理和を意味する記号である。

部を観察する」を記述した。この 2 つの概念は測定位置と対象出力物に基づいて分類した。「測定位置」スロットは表面・裏面の観察であれば「表面 | 裏面」、内部の観察であれば「内部」と定義した。

「対象出力物」スロットは 2.3 節で述べた「表現」のオントロジーをもとに記述した。例えば、「表面・裏面を観察する」という分析行為を行うと、観察した試料の「表面・裏面形態」を表す「形状画像」が出力されるので、「対象出力物」スロットのクラス制約に「形状画像」を記述し、そのサブスロットに「分析結果」スロットとしてクラス制約に「表面・裏面形態」を記述した。この「形状画像」は図 3.4 に示すように「表現」の下位概念の「形態の表現可視化結果」の下位概念として定義し、「表面・裏面形態」は図 3.5 に示すように「命題」の下位概念の「観察結果」の下位概念として定義した。「形状画像」に関して、上位概念の「形態の表現可視化結果」クラスで表現形態を「画像」と定義しているの、その下位概念である「形状画像」は表現形態が「画像」であることを継承している。また、形状画像が表す内容は、その物質の表面・裏面形態なので、「内容」スロ

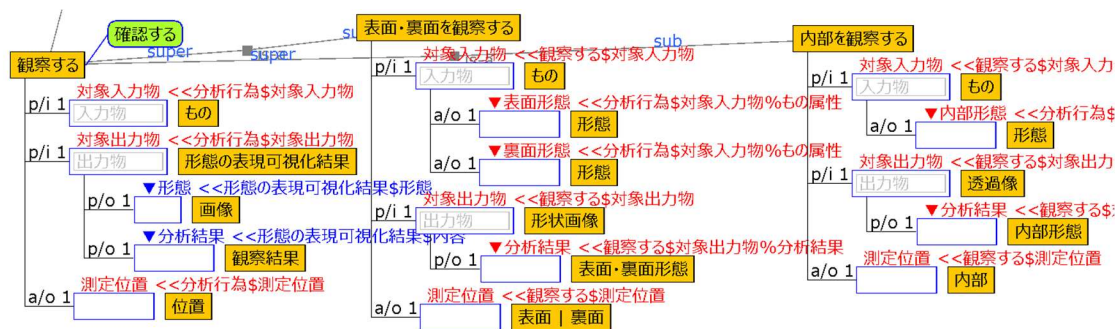


図 3.3 「観察する」の下位概念

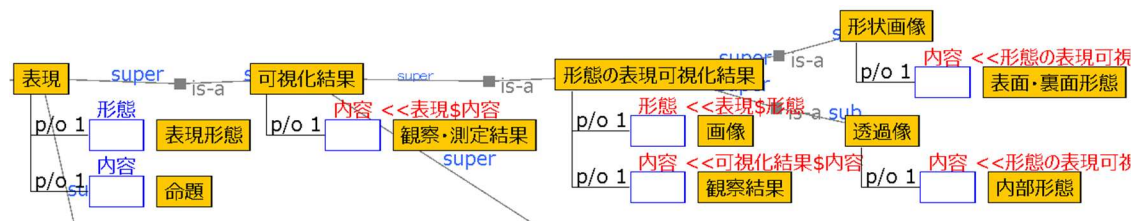


図 3.4 「形状画像」と「透過像」の定義

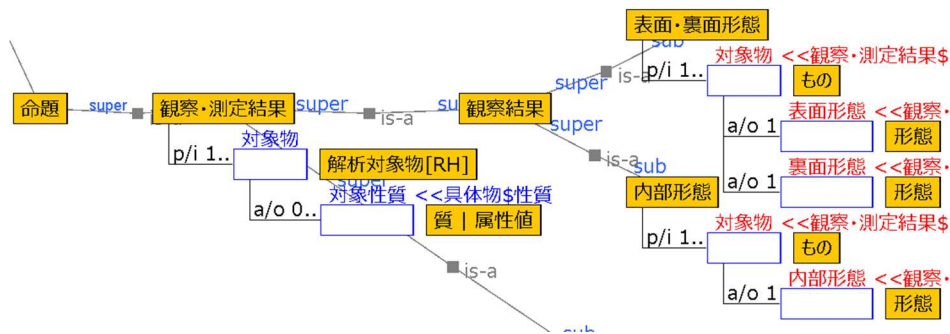


図 3.5 「表面・裏面形態」と「内部形態」の定義

ットのクラス制約に「表面・裏面形態」と記述した。

「表現」の下位概念の「可視化結果」クラスは「内容」スロットを持ち、このスロットのクラス制約である「観察・測定結果」は、図 3.5 で示す「命題」の下位概念に記述した。「観察・測定結果」クラスには、どの物質の分析結果であるかを表す「対象物」スロットを記述し、そのサブスロットに、その対象物のどの性質を分析したかを表す「対象性質」スロットを記述した。「観察・測定結果」クラスの下位概念である「表面・裏面形態」クラスの「対象物」スロットのサブスロットに「表面形態」スロットと「裏面形態」スロットを記述することで、「表面・裏面形態」という観察結果は解析対象物質の表面形態あるいは裏面形態を観察した結果であることを表現できた。

3.2.2 「測定する」の下位概念

3.2.2.1 割合を測定する

次に、図 3.2 右下で定義を示した「測定する」の下位概念について説明する。ここでは、図 3.6 に示す「測定する」の下位概念の「数量を測定する」の下位概念である「割合を測定する」について説明する。割合とは、ものの属性に対する属性であり、メタ属性の一種である。例えば、食塩水の濃度は、水と食塩の「質量」の「割合」で決まる。この場合、食塩水の濃度を測定するとき、解析対象物は濃度という「割合」であり、割合の対象属性は「質量」である。これを表現するために、「割合を測定する」の対象入力物スロットに図 3.7 に示す「比率」クラス制約として記述し、何の属性の割合であるか表すために「対象属性」スロットを記述した。この下位概念でこのスロットのクラス制約を「質量」とすることで、「質量」の割合であることを表現できる。

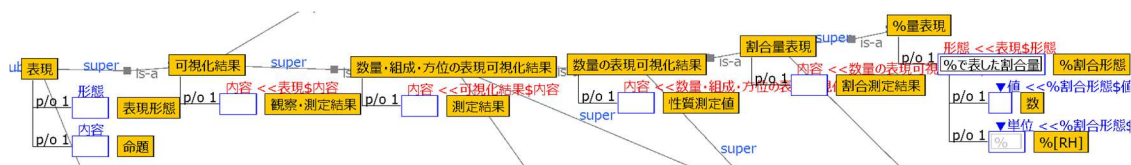


図 3.8 「%量表現」の定義



図 3.9 「割合測定結果」の定義

可視化結果」の下位概念として定義し、「割合測定結果」は図 3.9 に示すように「命題」の下位概念の「性質測定値」の下位概念として定義されている。

3.2.2.2 組成を分析する

元素を測定する際にその元素が全体に占める割合（濃度）が微量だと測定でき

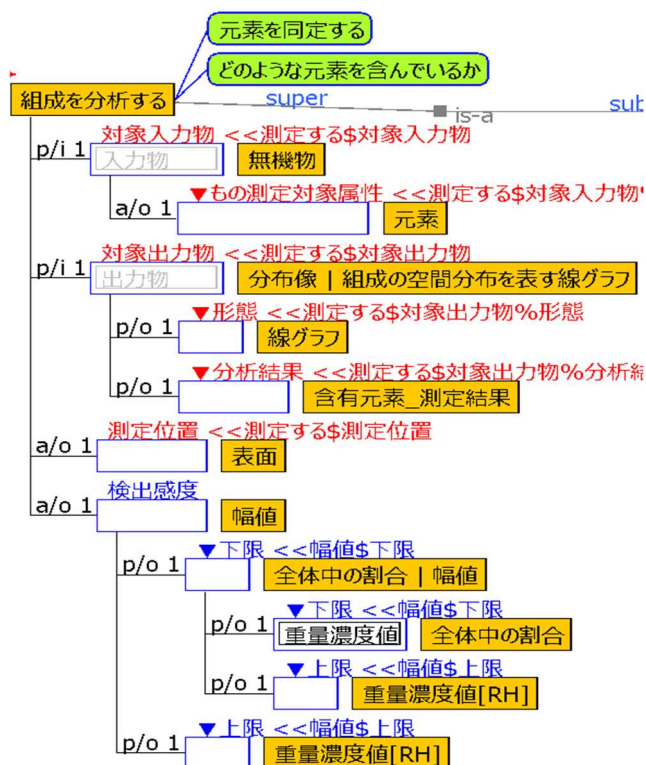


図 3.10 「組成を分析する」の定義

ないことがある．そのため，図 3.10 に示すように，どれだけ元素濃度があれば測定可能かを表す「検出感度」を定義した．検出感度は下限から上限の幅を持った値であるため，クラス制約に「幅値」，ロール名に「検出感度」と定義し，そのサブスロットとして「下限」スロットと「上限」スロットを記述した．また，下限にも幅があり，例えば「SEM-EDX 法は下限 0.5%~1%の検出感度を持つ分析手法である」と定義される．よって，下限スロットの中にサブスロットとして「下限」スロットと「上限」スロットを定義した．

また，検出感度を示す数値はその物質に含まれる元素の重量濃度であるため，クラス制約に「全体中の割合」，ロールホルダーに「重量濃度値」を定義した．

以上の定義によって，組成を分析する際に検出感度を考慮することが可能になる．

3.2.3 「加工する」の下位概念

「加工する」の下位概念として，図 3.11 のように「断面を出す」と「FIB 加工で断面を出す」を定義した．「断面を出す」は「加工する」のスロットを継承しているので，「対象入力物」スロットには切断される前の状態の物質が入り，「対象出力物」スロットには切断された後の状態の物質が入る．また，「断面を出す」という分析行為は物質を切断する，つまり物質を破壊してしまうので，「性質」スロットに「#オペレータ」を用いて「破壊性」と記述した．「#オペレータ」

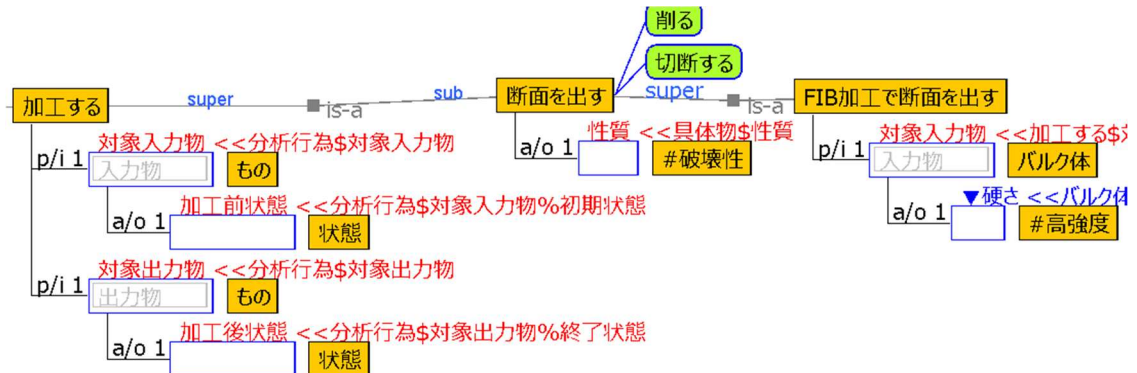


図 3.11 「加工する」の下位概念



図 3.12 「破壊性」の定義

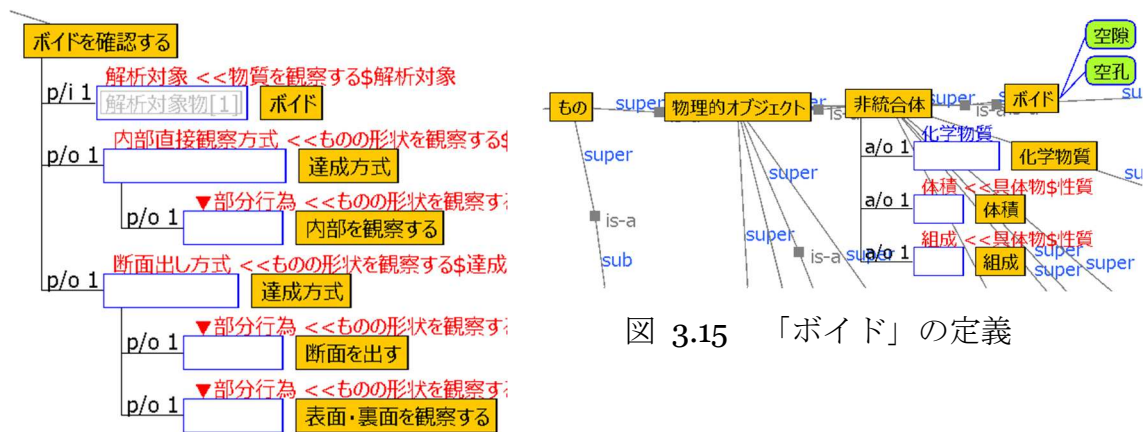


図 3.14 「ポイドを確認する」の定義

に大別した。この区別は、部分行為に「観察する」を持つか「測定する」を持つかの違いである。

3.3.1 「ものの形状を観察する」の下位概念

図 3.14 に定義を示す、「ものの形状を観察する」の下位概念である「ポイドを確認する」について説明する。ポイドとは、物質内の粒子と粒子の隙間のことをいい、「ポイドを確認する」は、ポイドが物質内に含まれているかどうかを確認することである。ポイドは図 3.15 に示すように「もの」の下位概念として定義した。ポイドは隙間であり実体がないので、「もの」の下位概念とは言い難いが、この定義により図 3.14 に示すように「ポイドを確認する」の「解析対象」スロットに「ポイド」を記述することができ、上位概念である「分析目的行為」クラスの「解析対象」スロットのクラス制約との整合性が取れた。図 3.14 では「ポイドを確認する」という全体行為を達成する方式を 2 つ定義し、1 つは「内部を観察する」ことで達成する「内部直接観察方式」、もう 1 つは「断面を出し」、その断面を「表面・裏面を観察する」ことで達成する「断面出し方式」を記述した。このように定義することで、1 つの「ポイドを確認する」という分析目的行為を達成するには、複数の方式から適切な方式を選択し、その方式内の部分行為を行う(例えば「断面出し方式」を選択した場合、加工行為である「断面を出す」や観察行為である「表面・裏面を観察する」のような部分行為を行う)ことで達成できるということを表現した。

3.3.2 「ものの属性を測定する」の下位概念

次に、「ものの属性を測定する」の下位概念である「空隙率を測定する」について説明する。空隙率とは、ポイドが物質全体にどれだけ含まれているかを表し

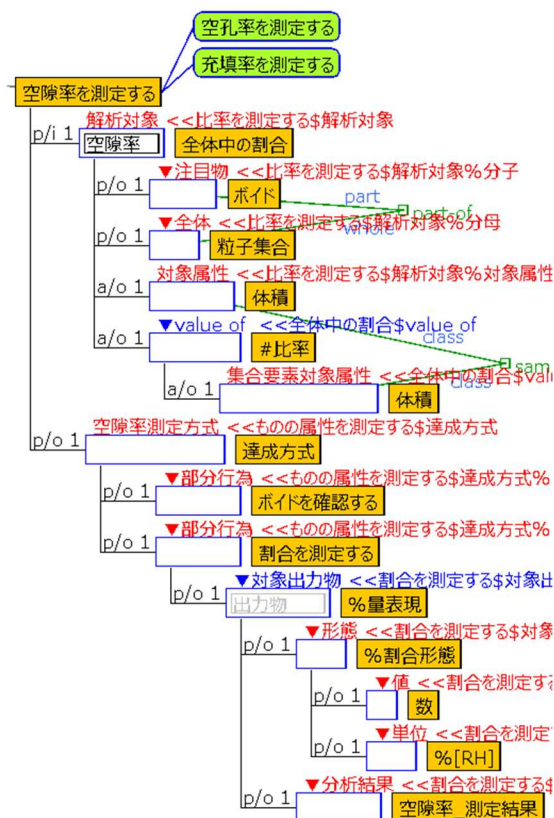


図 3.16 「空隙率を測定する」の定義

た割合のことをいい，空隙率 $\epsilon = \frac{\text{ボイドの体積}(v [m^3])}{\text{物質総体積}(V [m^3])}$ の式で計算できる．これを表現

するために，図 3.16 に示すように，「解析対象」スロットに「比率」をクラス制約とした「空隙率」を記述し，そのサブスロットに，空隙率は粒子集合という「全体」のうち，ボイドという「注目物」がどれだけの割合を占めるかという割合であることを記述した．また，その割合の対象属性がボイドと粒子集合の「体積」であることを記述した．また，その割合の対象属性がボイドと粒子集合の「体積」であることを記述した．さらに，達成方式として「ボイドを確認し」，空隙率に関する「割合を測定する」ことで達成できる「空隙率測定方式」を記述した．このように，部分行為に「ボイドを確認する」のような分析目的行為を持つ分析目的行為も存在する．加えて，この部分行為の「割合を測定する」の「対象出力物」スロットは，分析行為の「割合を測定する」の「対象出力物」スロットを継承している．部分行為の「割合を測定する」は空隙率に関する割合を測定し，その結果として空隙率が明らかになるので，これを表現するために，「対象出力物」

スロットのサブスロットである「分析結果」スロットに「空隙率_測定結果」を記述した。

3.4 分析目的行為と部分行為(分析行為)が同じ名前になるケース

分析目的行為の中には部分行為(分析行為)と同じ名前になるものがあり、図 3.17 はその一例である。これは、「組成分布を測定する_2」を達成するには単一の部分行為として「組成分布を測定する」ことで達成できる、という表現になっている。このような記述になる理由は、「組成分布を測定する」という分析目的行為を部分行為に分けることなく直接に実行できる機能を持つ分析装置(4.1 節で述べる)や分析手法(4.2 節で述べる)があり、分析目的行為に対して複数の部分行為(分析行為=分析装置の機能、分析行為=分析手法の基本動作)に分解する必要がないからである。分析目的行為と分析行為の名前が同じになってしまうものは「組成分布を測定する」以外に、「粒径を測定する」や「結晶方位を測定する」、「元素の分散性を測定する」などがある。法造エディタは同じ名前のクラスを 2 つ定義した際、2 つ目に定義したクラスの名の後ろに「_2」を自動的に記述し、同じ文字列にならないような仕様になっている。本研究では、分析行為を先に定義した後に分析目的行為を定義したので、分析行為と同じ名前の分析目的行為はクラス名の後ろに「_2」がついている。

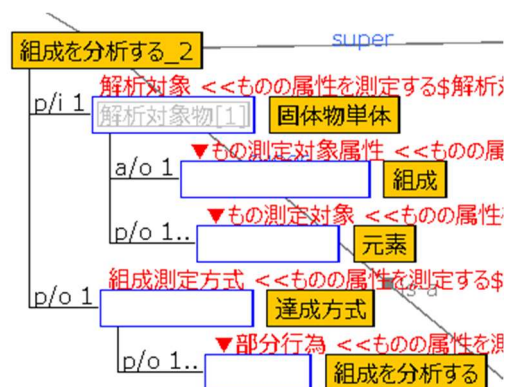


図 3.17 分析目的行為と部分行為(分析行為)が同じ名前の例

第4章 分析手法に関するオントロジーの構築

4.1 分析装置オントロジー

分析装置の定義について説明する．図 4.1 に定義を示すように，「分析装置」クラスは，主に，「分析行為」をクラス制約とする「機能」，「放射線 | 化学物質」をクラス制約とする「入射物」「検出物」をスロットに持つ．また，分析装置を「電子線入射装置」と「X 線入射装置」と「イオン入射装置」の 3 つに分類した．これらの区別は，使用媒体が「電子線」か「X 線」か「イオン」の違いである．電子線と X 線は図 4.2 に示すように「放射線」の下位概念として，イオンは図 4.3 に示すように「化学物質」の下位概念として定義した．また，電子線は「表面・裏面」を分析する際に用いる媒体で，X 線は「内部」を分析する際に用いる媒体であるので，「電子線入射装置」と「X 線入射装置」の区別は，使用媒体が「電子線」か「X 線」の違いであると同時に，測定位置が「表面・裏面」か「内部」の違いでもある．これを表現するため，「電子線入射装置」の「測定位置」スロットに「表面 | 裏面」，「X 線入射装置」の「測定位置」スロットに「内部」を記述した．

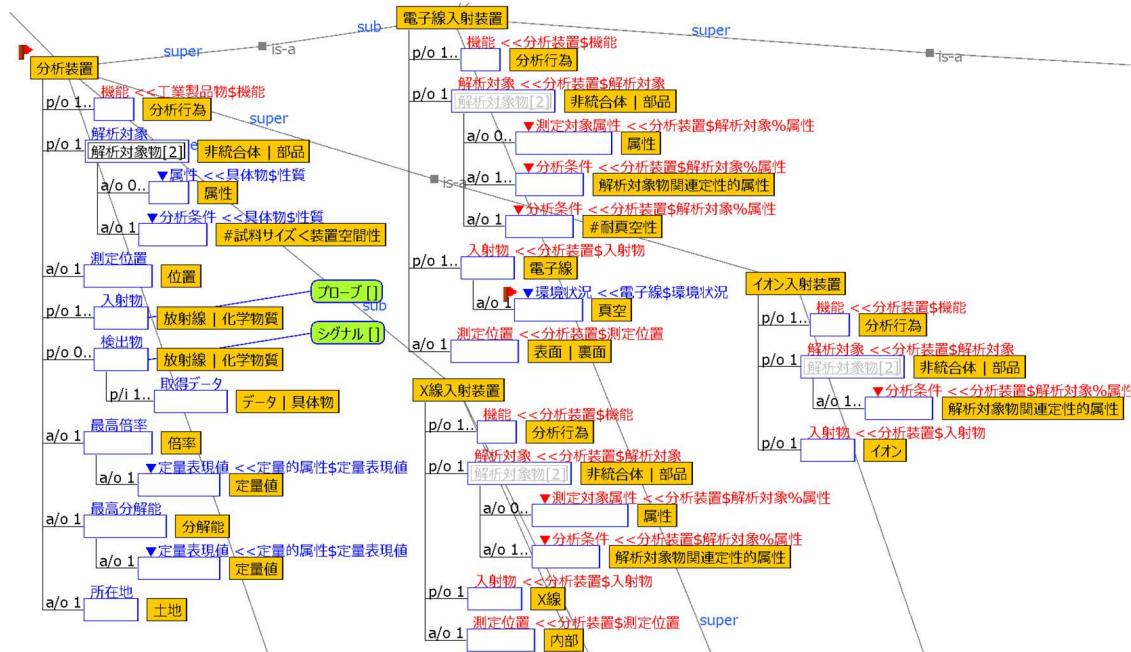


図 4.1 「分析装置」の定義

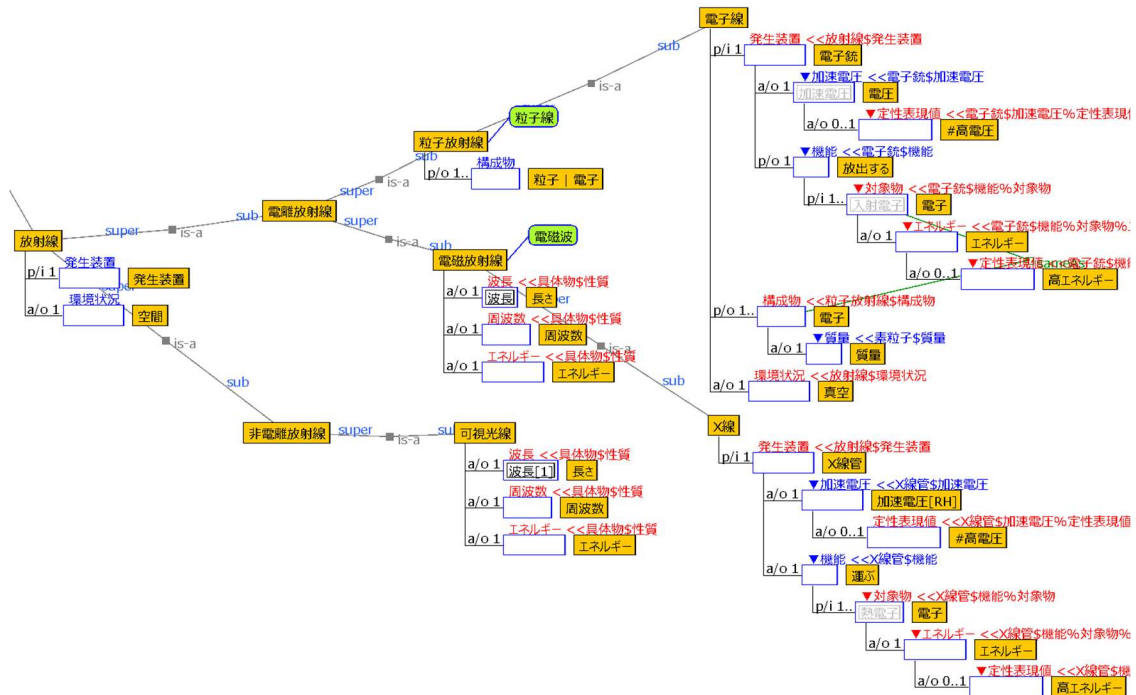


図 4.2 「電子線」と「X線」の定義

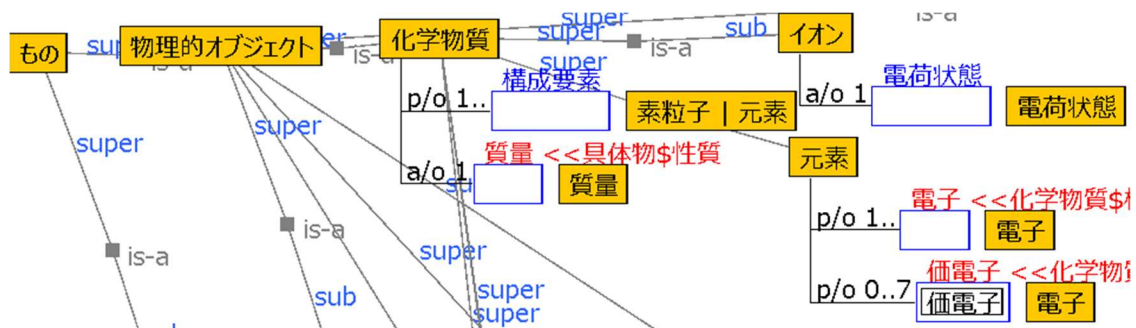


図 4.3 「イオン」・「価電子」の定義

ここでは、図 4.4 に示す「電子線入射装置」の下位概念の「SEM 系装置」と「走査電子顕微鏡」を説明する。SEM 系装置は、電子銃から放出された電子(入射電子)を観察領域の端から端まで照射させ、表面から電子が散乱するうちの、入射電子がそのまま散乱された電子(反射電子)と、入射電子が試料に入り込み、弾き出された試料中の価電子(二次電子)の種類の電子の量に応じて濃淡をつけた画像で表面の形状を可視化する装置である。反射電子の量に応じて濃淡をつけた画像は「反射電子像」、二次電子の量に応じて濃淡をつけた画像は「二次電

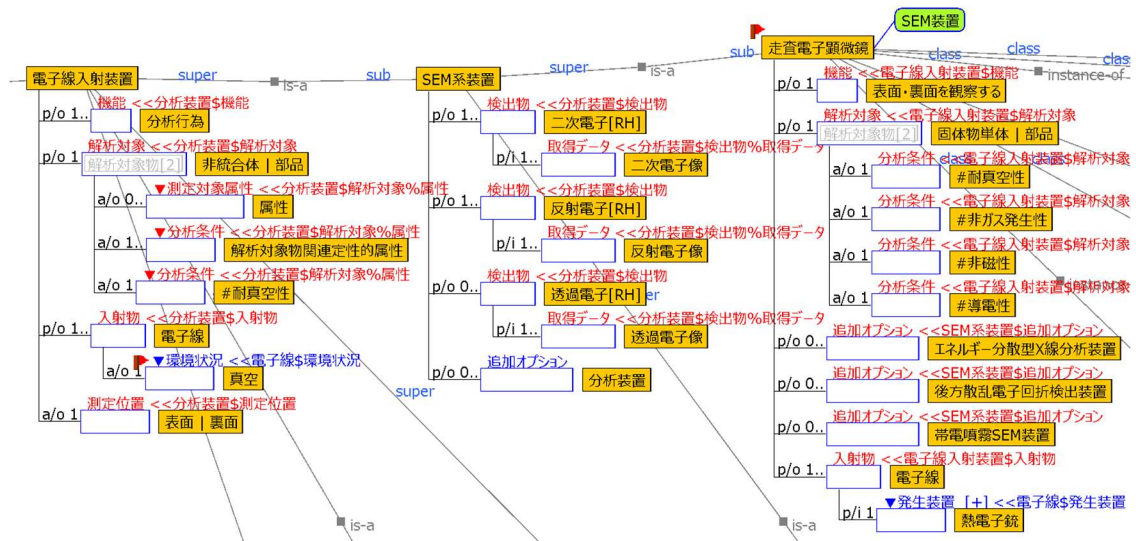


図 4.4 「電子線入射装置」の下位概念

子像」と呼ばれる。また、場合によって、試料に透過して真空中に放出される電子(透過電子)を使用することもあり、透過電子の量に応じて濃淡をつけた画像(透過電子像)を情報として用いることがある。つまり、**SEM 系装置**は反射電子像と二次電子像、透過電子の 3 つのデータを用いて表面の分析を行っている。これを表すために、「**SEM 系装置**」に「検出物」スロットを 3 つ定義し、それぞれに「取得データ」サブスロットを定義し、クラス制約にそれぞれ「二次電子像」、「反射電子像」、「透過電子像」を記述した。検出物として二次電子と反射電子は必ず使用するので個数制約に「1..」¹を記述し、透過電子は使用しない場合もあるので「o..」を記述した。正確には、**SEM 系装置**は「反射電子像」と「二次電子像」の 2 つの画像データを出力し、それを用いて表面の形状を可視化する。そのため、「二次電子像」と「反射電子像」は装置が出力するデータなので、「観察する」行為の対象出力物に概念的に対応する。また、「**SEM 系装置**」は「電子線入射装置」の「測定位置」スロットを継承しているので、「**SEM 系装置**」の「測定位置」スロットには「表面 | 裏面」が入っており、「**SEM 系装置**が表面の分析を行っている」ことも表現できている。

¹ 法造において、個数制約の「n..」(n は整数)は「n 以上」を表す。

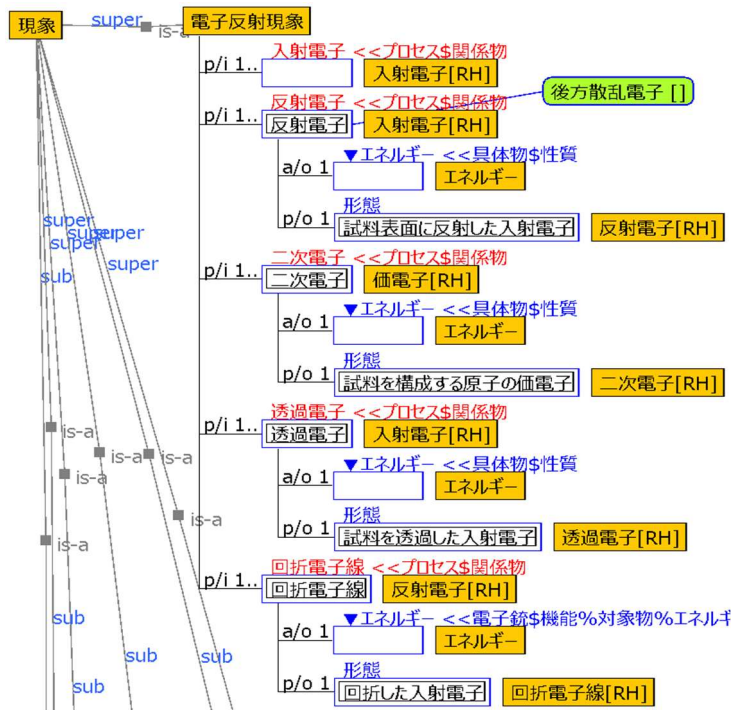


図 4.5 「入射電子」・「反射電子」・「二次電子」・「透過電子」の定義

入射電子，反射電子，二次電子，透過電子の定義を図 4.5 に示す．これらの電子は，電子銃で試料に電子を当てたときの電子が反射される現象の中に現れる．そのため，「現象」クラスの下位概念として「電子反射現象」を定義し，要素として「入射電子」スロット，「反射電子」スロット，「二次電子」スロット，「透過電子」スロットを記述した．入射電子は電子銃から放出された電子なので，図 4.6 に示す「電子銃」の定義内の「対象物」スロットで「入射電子」をロールホルダーとして定義し，それを「電子反射現象」クラスの「入射電子」スロットのクラス制約で参照した．ロールホルダーとは，ロールを担った状態での実体のことをいい[4]，電子銃が放出する「対象物としての役割」を担った「電子」を「入射電子」と呼ぶため，入射電子をロールホルダーとして定義した．「法造」はロールホルダーを「RH」と略すため，「入射電子」スロットのクラス制約に「入射電子[RH]」と記述されている．反射電子は入射電子がそのまま散乱された電子なので，「反射電子」スロットのクラス制約に「入射電子[RH]」を記述した．二次電子は入射電子により弾き出された試料を構成する価電子なので，図 4.3 に示す「元素」の定義で「価電子」ロールホルダーを定義し，それを「電子反射現象」クラスの「二次電子」スロットのクラス制約で参照した．

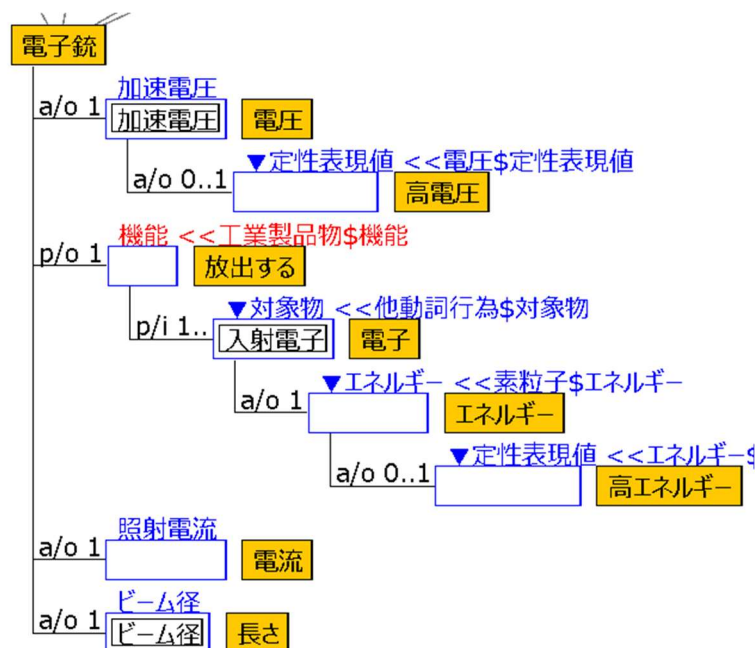


図 4.6 「入射電子ロールホルダー」の定義

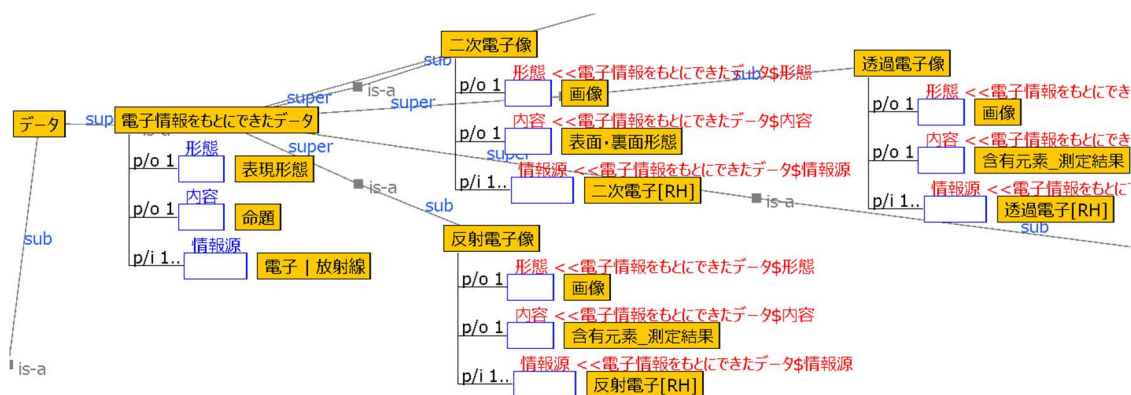


図 4.7 「二次電子像」・「反射電子像」・「透過電子像」の定義

二次電子像, 反射電子像, 透過電子像の定義を図 4.7 に示す. これらは「データ」クラスの下位概念として定義した. 二次電子像は試料の表面裏面の形態を濃淡画像で表したものであるため, 「形態」スロットに「画像」, 「内容」スロットに「表面・裏面形態」を記述した. 反射電子像と透過電子像は試料に含まれる元素情報を濃淡画像で表したものであるため, 「形態」スロットに「画像」, 「内容」スロットに「含有元素_測定結果」を記述した. また, 各像は各電子の量で濃淡を付けた

画像なので、二次電子像の「情報源」スロットに「二次電子[RH]」を、反射電子像の「情報源」スロットに「反射電子[RH]」を、透過電子像の「情報源」スロットに「透過電子[RH]」を記述した。

図 4.4 に示すように、「SEM 系装置」の下位概念として「走査電子顕微鏡」を定義した。「走査電子顕微鏡」は上位概念である SEM 系装置の「検出物」スロットを継承している。そして、試料の表面・裏面を観察する機能を持つ装置であるので、「走査電子顕微鏡」クラスの「機能」スロットに「表面・裏面を観察する」を記述した。また、「固体物単体・部品」を解析対象物とする装置であるので、「解析対象」スロットに「固体物単体 | 部品」を記述した。しかし、固体物単体であればどのようなものでも解析することができるわけではなく、走査電子顕微鏡には使用条件があり、使用条件を満たした特定の性質を持つものしか分析することができない。このことは走査電子顕微鏡のみならず、各分析装置にそれぞれ使用条件がある。これを表現するために、図 4.4 に示すように各分析装置クラスの「解析対象」スロットのサブスロットに「分析条件」スロットを記述し、第 5 章で述べる分析条件オントロジーで定義した概念(「解析対象物関連定性的属性」)をクラス制約に記述した。例えば、走査電子顕微鏡は使用条件として、解析対象物が真空状態で壊れないこと、真空状態でガスが発生しないこと、磁性がないこと、導電性であることであることが求められる。それらをそれぞれ「耐真空性」、「非ガス発生性 (真空状態)」、「非磁性」、「導電性」と定義し、図 4.4 に示す走査電子顕微鏡の定義のように、解析対象物の「分析条件」スロットのクラス制約として、3.2.3 項で述べたクラスそのものがスロットに入ることを表す「#オペレータ」を用いて記述した。この記述は、3.1 節で述べた第 3 の課題の解決に対応している。

また、走査電子顕微鏡に限り、走査電子顕微鏡にエネルギー分散型 X 線分析装置や後方散乱電子回折検出装置、帯電噴霧 SEM 装置を組み込むことで、もともとの走査電子顕微鏡の機能である「表面・裏面を観察する」に加えて、「組成を分析する」や「結晶方位を測定する」、「粒径を測定する」という機能を付け加えることができる。これを表現するために、「走査電子顕微鏡」クラスの「追加オプション」スロットに「エネルギー分散型 X 線分析装置」、「後方散乱電子回折検出装置」、「帯電噴霧 SEM 装置」を記述した。

4.2 分析手法に関するオントロジー

次に図 4.8 に示す分析手法の定義について説明する。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」、「放射線 | 化学物質 | 素粒子 | 熱プラズマ」をクラス制約とする「入射物」「検出物」をスロットとして記述し、分析手法を入射物別に「電子線入射分析手法」、「X 線入射分析手法」、「イオン入射分析手法」、「熱プラズマ入射分析手法」の 4 つに大別した。

「電子線入射分析手法」の下位概念を図 4.9 に示す。大きく「SEM 系分析手法」とそれ以外で分類しており、「SEM 系分析手法」の下位概念に「走査電子顕

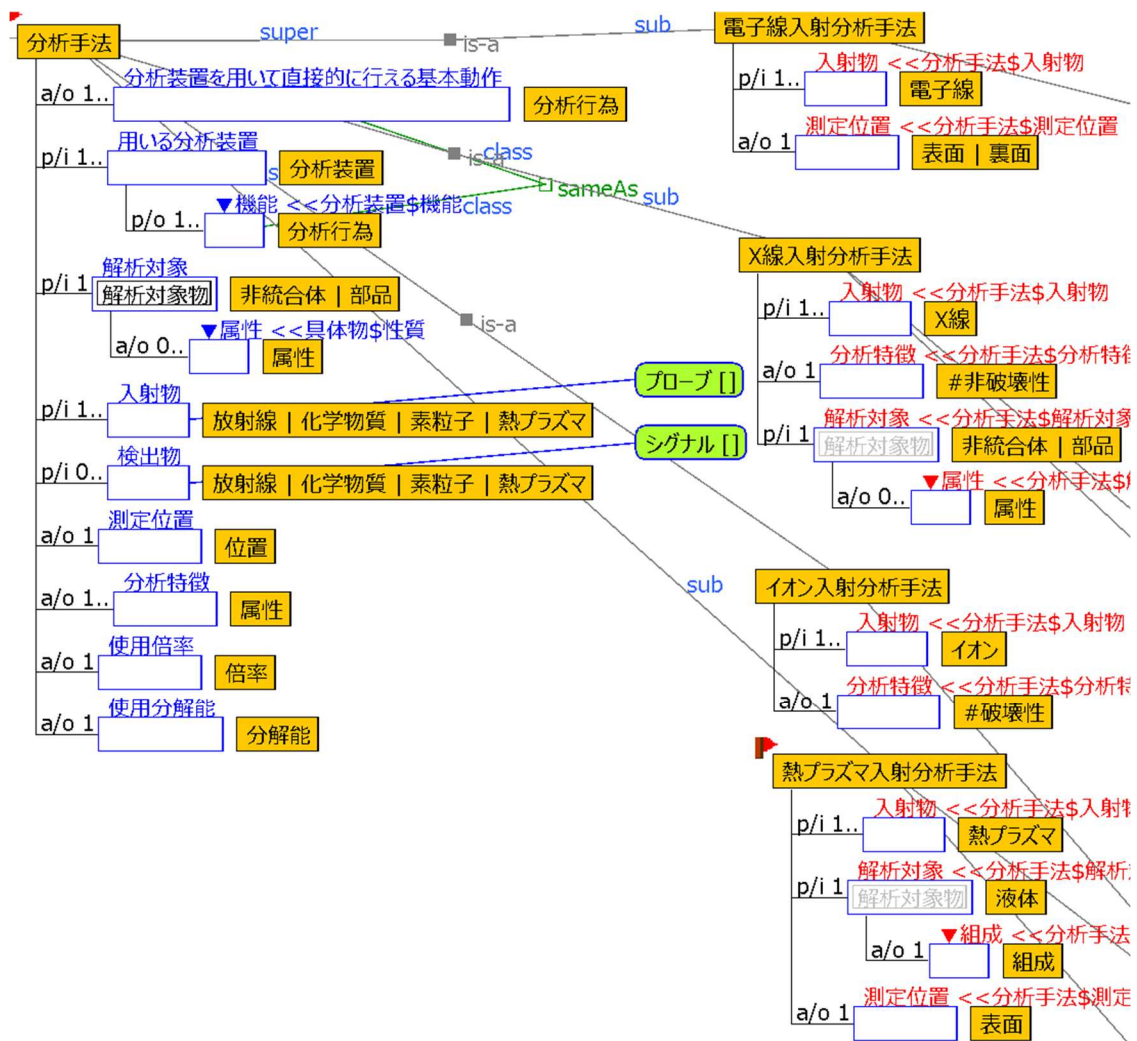


図 4.8 「分析手法」の定義

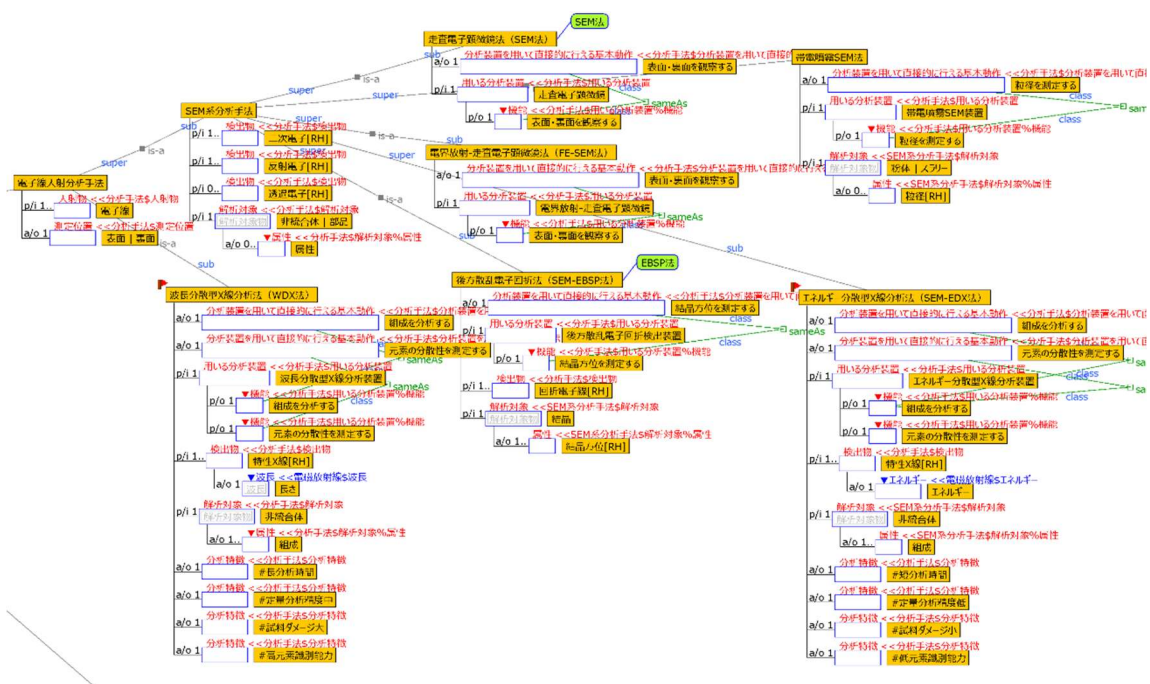


図 4.9 「電子線入射手法」とその下位概念の定義

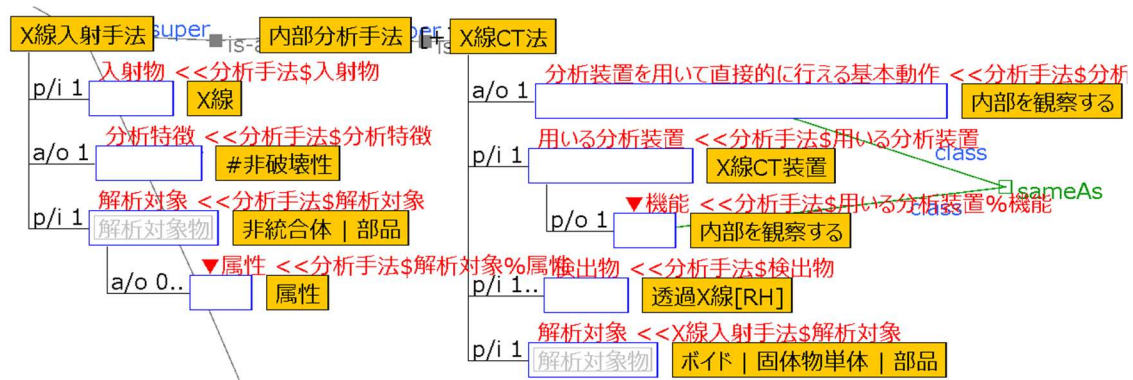


図 4.10 「X線入射手法」とその下位概念の定義

微鏡法(SEM 法)」、「電界放射-走査電子顕微鏡法(FE-SEM 法)」、「後方散乱電子回析法(EBSP 法)」、「エネルギー分散型 X 線分析法(SEM-EDX 法)」、「帯電噴霧 SEM 法」を、それ以外の分析手法として「波長分散型 X 線分析手法(WDX 法)」を定義した。

その他に、図 4.10 に示すように、「X 線入射手法」は「入射物」スロットに「X 線」をクラス制約として記述した。また、X 線を利用した手法は物質を非破壊で分析できるので、それを表現するために「分析特徴」スロットのクラス制約に「#

非破壊性」を記述した。

「分析手法」に、「分析行為」をクラス制約とし、汎用的な分析内容を指す「基本動作」スロットを定義した。また、分析目的が、複数の分析行為の列で構成される複数の達成方式により達成される目的—達成関係を明示的に定義した。これにより、多く存在する分析手法の定義において、直接的に分析目的を参照することなく汎用的な分析行為を再利用できるため、手法によって明らかにできる分析目的が増えるごとに分析手法に新たなスロットを定義する必要がなくなり、3.1 節で述べた第 2 の記述量の爆発の課題を解決した。具体的には、分析目的と分析手法を一对一対応で記述する方式と比べ、分析手法に関するクラス数とスロット数の合計記述量を 55%削減できた。

「走査電子顕微鏡」を用いて行う分析手法が「走査電子顕微鏡法」のように、研究で対象となっている分析手法は全て「分析装置名=分析手法名」となっており、各分析手法はそれぞれ該当する分析装置を用いて分析する。従って、各「分析手法」の「用いる分析装置」をロール名としたスロットのクラス制約として具体的な「分析装置」を記述した。また、装置の機能と分析手法が行う基本的な動作は一致する。例えば、走査電子顕微鏡法で行える分析内容は「表面・裏面を観察する」ことであるが、それは走査電子顕微鏡の機能が行うことである。つまり、走査電子顕微鏡法は走査電子顕微鏡を用いて直接的に行える基本動作として「表面・裏面を観察する」ことができると言える。このことを、「分析装置を用いて直接的に行える基本動作」と、用いる分析装置のスロットの「機能」を「sameAs」リンクで繋ぐことで表現した。このリンクは、A という概念から B という概念にリンクを繋ぐとき、A と B は値が等しいことを意味するリンクである。

エネルギー分散型 X 線分析手法と波長分散型 X 線分析手法は、どちらも特性 X 線を検出する手法であるが、前者は特性 X 線のエネルギーを、後者は特性 X 線の波長を検出して分析するので、エネルギー分散型 X 線分析手法の「検出物」スロットに「エネルギー」サブスロットを、波長分散型 X 線分析手法の「検出物」スロットに「波長」サブスロットを記述した。

第5章 分析条件に関するオントロジーの構築

5.1 分析条件オントロジー

本研究では分析条件は分析装置のもつ条件であり，解析対象物の定性的な属性で記述され，2 つに大別できる．1 つは分析装置の環境に依存する条件である．例として，耐真空性が挙げられる．これは解析時に分析装置の測定空間を真空にするため，解析対象物は真空状態にしても壊れないことが求められるという条件である．このような条件は解析対象物の測定空間といった解析状況に依存していると捉えることができる．2 つ目は解析対象物それ自身が持つ条件である．例として，密度不均一性が挙げられる．密度は他に依存せず解析対象物自身が持つ条件であると捉えられる．これらを表現するために，図 5.1 に定義を示すように，前者を「解析状況依存属性」，後者を「解析対象物自身が持つ属性」を定義した．

5.2 解析状況依存属性

解析状況依存属性とは，分析装置の測定空間内の環境に依存する条件である．例として，図 5.2 に示す「耐真空属性」と，その下位概念であり図 5.3 に示す

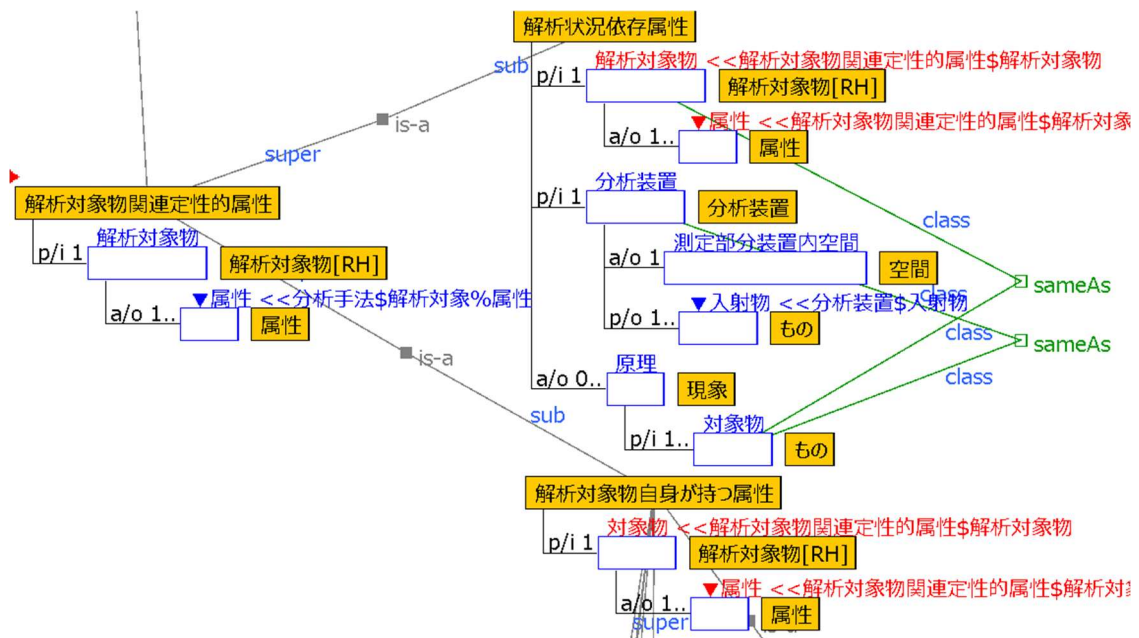


図 5.1 分析条件に関する 2 つの定性的属性

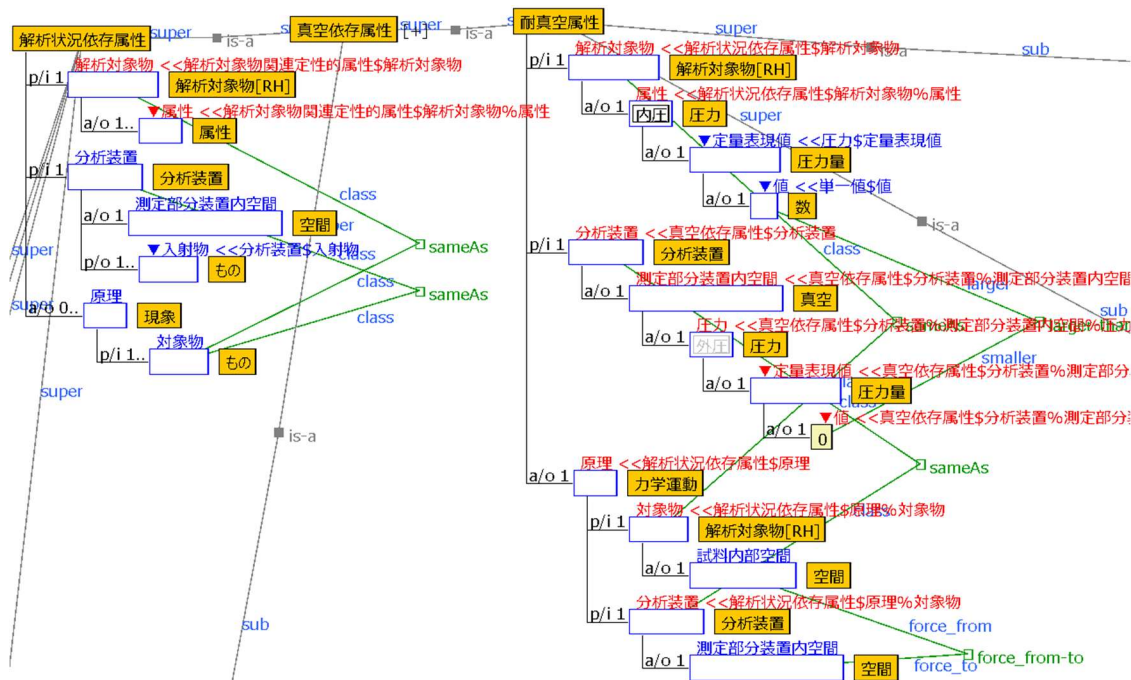


図 5.2 「耐真空属性」の定義

「耐真空性」が挙げられる。これは、試料を解析する際、装置内の測定空間を真空にする装置の場合、試料は真空空間に置いても壊れないことが求められるという条件である。このように、装置の測定空間の環境が試料に影響を及ぼすような条件を「解析状況依存属性」の下位概念に定義した。

「耐真空属性」には次の 3 つを記述した。1 つ目は「解析対象物」スロット内の「内圧」をロールホルダーとしたスロットを記述した。これにより、解析対象物には内圧という圧力量を物質内に保持していることを表現した。2 つ目の記述として「分析装置」スロット内の「測定部分装置内空間」サブスロットに圧力量が 0 であることを記述した。これにより、装置内の測定空間が真空(圧力量=0)であることを表現した。また、物質の内圧の圧力量は正の数であり、それは装置空間の圧力量の 0 よりも値が大きいのので、これを表現するために **larger-than** リンクを用いて、「数」に **larger**, 「0」に **smaller** と繋いだ。このリンクは、A という概念から B という概念にリンクを繋ぐとき、A(**larger**)は B(**smaller**)よりも値が大きいのことを意味するリンクである。3 つ目の記述として力学運動の原理を記述した。ここでは、物質の内圧量が装置空間の圧力量よりも大きいことから、解析対象物の試料内部から装置空間に向かって力が働くことを **force_from-to** リンクを用いて記述した。このリンクは、A という概念から B という概念にリン

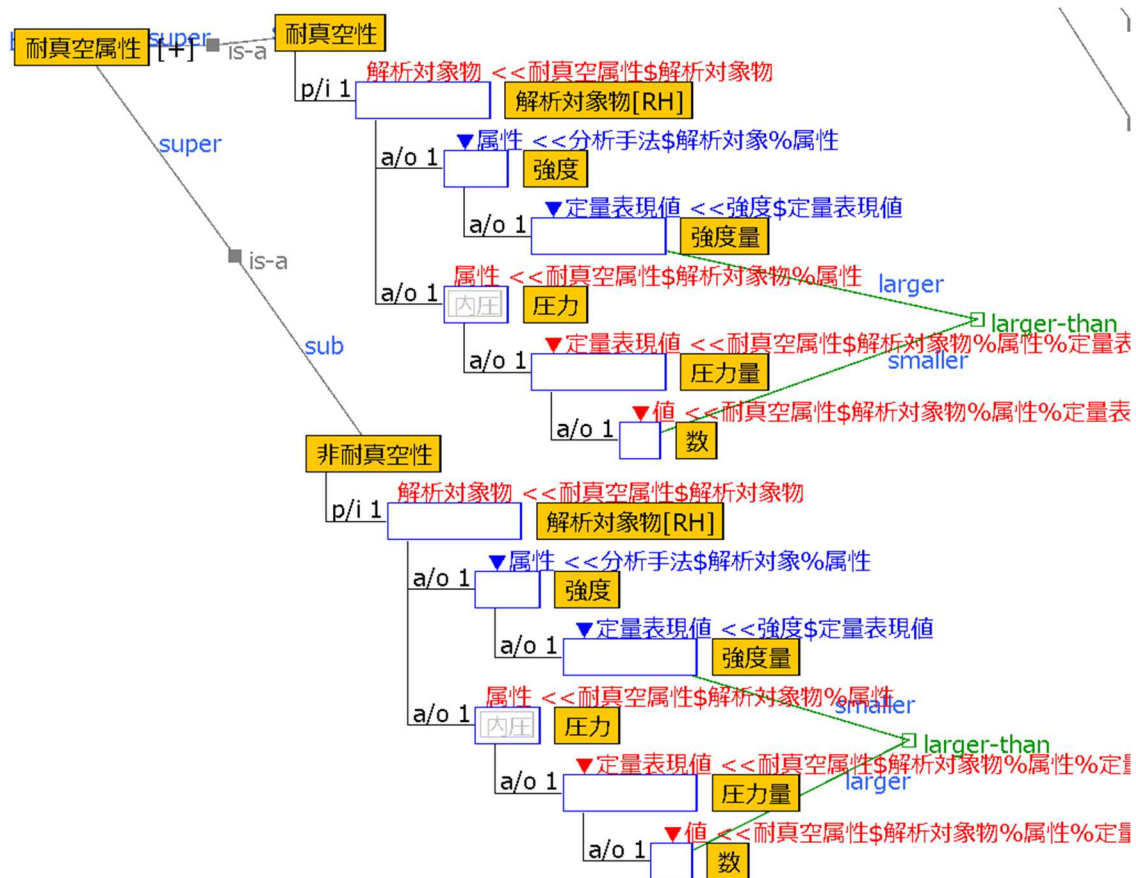


図 5.3 「耐真空性」の定義

クを繋ぐとき, A(force_from)から B(force_to)に向かって力が働くということの意味するリンクである. これにより, 物質内部で力がどのように働いているのかを原理レベルで定義することができ, 次に述べる耐真空性の定義に際して, 物質が真空に耐えられることの厳密な力学運動を表現した.

図 5.3 に示すように, 「耐真空属性」の下位概念に「耐真空性」と「非耐真空性」を定義した. 「耐真空性」に, 物質内部からの圧力量よりも物質の硬度量が大きいことで試料は壊れない, ことを表現するために, 「硬度量」スロットと「圧力量」スロットを記述し, larger-than リンクを用いて, 「硬度量」に larger, 「圧力量」に smaller と繋いだ. 「非耐真空性」には, 「耐真空性」と真逆のことを記述した. このように定義することで, より厳密に装置の分析条件を表現することができ, 加えて分析条件に関するモデリング知識の再利用を視野に入れた定義をすることができた.

5.3 解析対象物自身が持つ属性

解析対象物自身が持つ属性とは、分析装置の測定空間内の環境に依存せず、試料そのものが持つ属性に依存する条件である。例として、図 5.4 に示す「密度不均一性」が挙げられる。密度は物質自身が持つ属性であり、密度が均一か不均一かで測定に影響が出るのは、試料そのものの属性に依存していると捉えられる。このように、装置の測定空間の環境に依存せず、試料自身が持つ属性で装置による測定に影響が出る条件を「解析対象物自身が持つ属性」の下位概念に定義した。

密度不均一性には、解析対象物自身が持つ密度に関する属性であることを表現するために、クラス制約を「密度均一度」とした「属性」スロットを記述した。また、「定性表現値」スロットのクラス制約に「全体的に不均一」と記述した。

例えば、X 線 CT 装置は密度が不均一な試料のみ分析できる。これを表現するために図 5.5 に示すように、X 線 CT 装置の分析条件スロットに「#密度不均一性」を参照した。

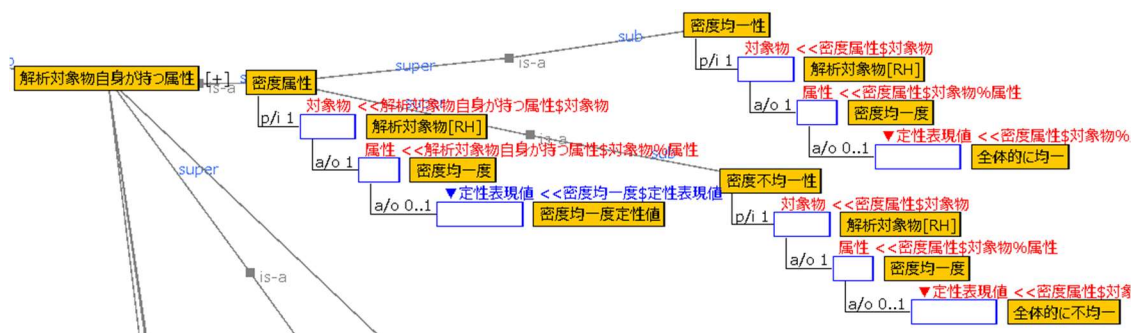


図 5.4 「密度不均一性」の定義

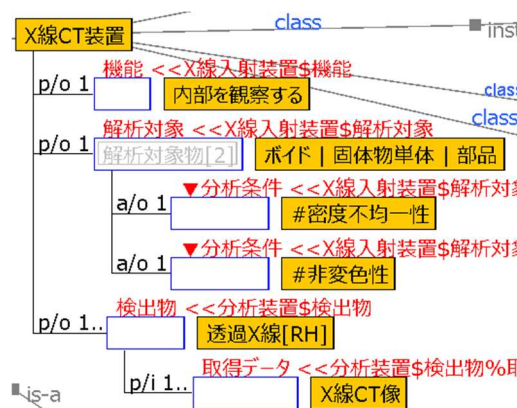


図 5.5 X 線 CT 装置の分析条件

第6章 オントロジーを利用した推薦

6.1 推薦プロセス

本節では、ここまでで述べたオントロジーをどのように使うことができるかを、具体例を使って述べる。「固体試料の中にボイドが含まれている可能性があり、ボイドの有無を調査したい。」という分析依頼に対して、以下のようにオントロジーを使うことで、最適な分析手法と分析装置を推薦することができる。

まず、分析目的から部分行為を抽出する。今回の例では「ボイドの有無を調査したい」が分析目的なので、まず、図 6.1(左)に示す「ボイドを確認する」という分析目的行為の定義が参照され、その達成方式・部分行為として、「内部直接観察方式」スロットの部分行為である「内部を観察する」と、「断面出し方式」スロットの部分行為である「断面を出す」・「表面・裏面を観察する」が抽出される。

次に、抽出した部分行為を基本動作に持つ分析手法が選択される。図 6.1(右)に示すように、基本動作が「内部を観察する」である「X 線 CT 法」, 「表面・裏面を観察する」である「走査電子顕微鏡法」と「電解放射-走査電子顕微鏡法」の 3 つが選択される。

次に、例えば、ここでインタラクションの結果、「非破壊」で分析しないといけないことが新たに判明したとする。この場合、「断面出し方式」の部分行為である「断面を出す」が図 6.2 に示すように「破壊性」のある行為なので、「断面出し方式」は破壊性のある分析行為を伴う。従って、最初の分析目的行為の達成

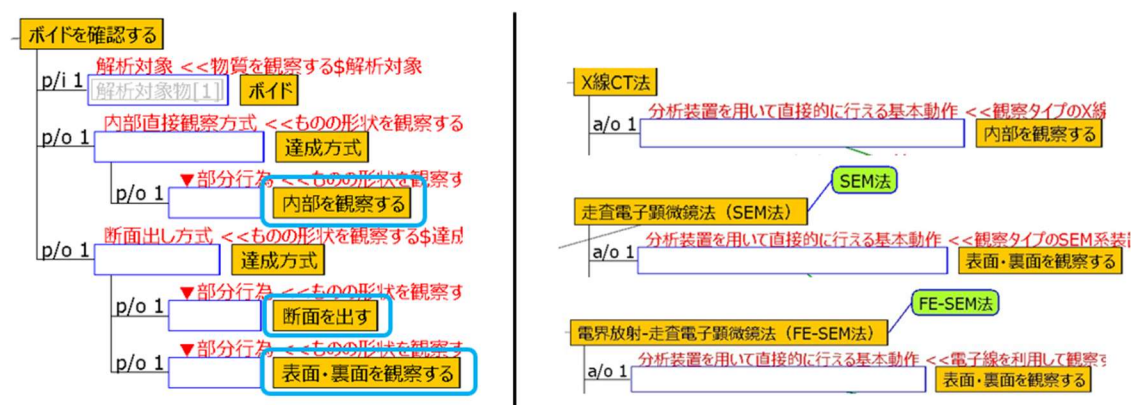


図 6.1 分析手法の選定フロー

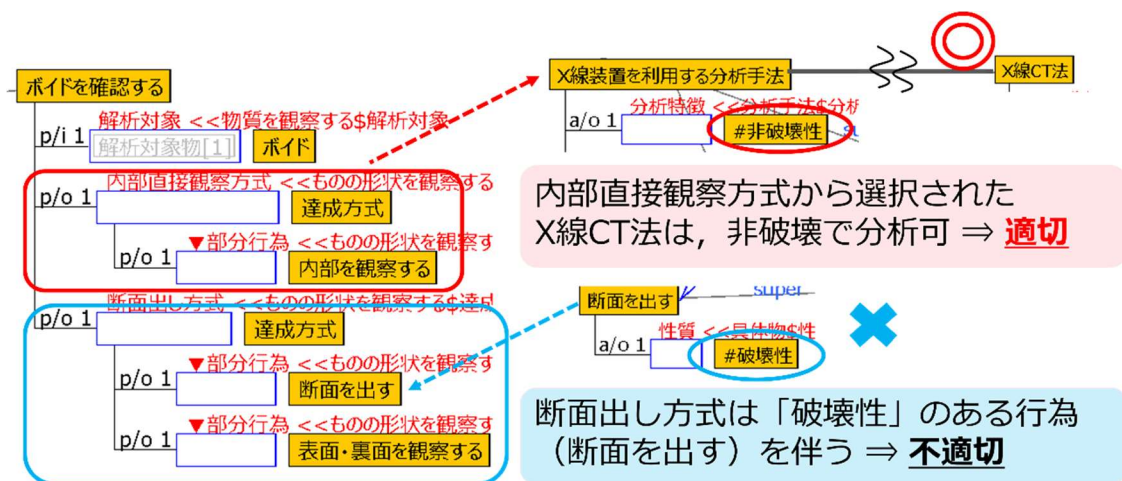


図 6.2 非破壊性と破壊性

方式とその部分行為を選択するステップで、「断面出し方式」から辿って選択された「走査電子顕微鏡法」と「電解放射-走査電子顕微鏡法」は適切な分析手法ではなくなるため、候補から除外される。一方で、「内部直接観察方式」から辿って選択された「X 線 CT 法」は図 6.2 に示すように、「非破壊性」という分析特徴を継承しており、これはインタラクション結果を満たしているため候補から除外されない。以上より、例として示した分析依頼から導き出される最適な分析手法は「X 線 CT 法」となる。

次に、図 6.3 に示すように、最適な分析手法が用いている装置の分析条件を確認する。この例では、「X 線 CT 法」が用いている「X 線 CT 装置」の分析条件を確認する。今回の条件は、「解析対象物が低密度・非変色性」であった場合とすると、これは分析条件を満たしているため、X 線 CT 法を使う際に X 線 CT

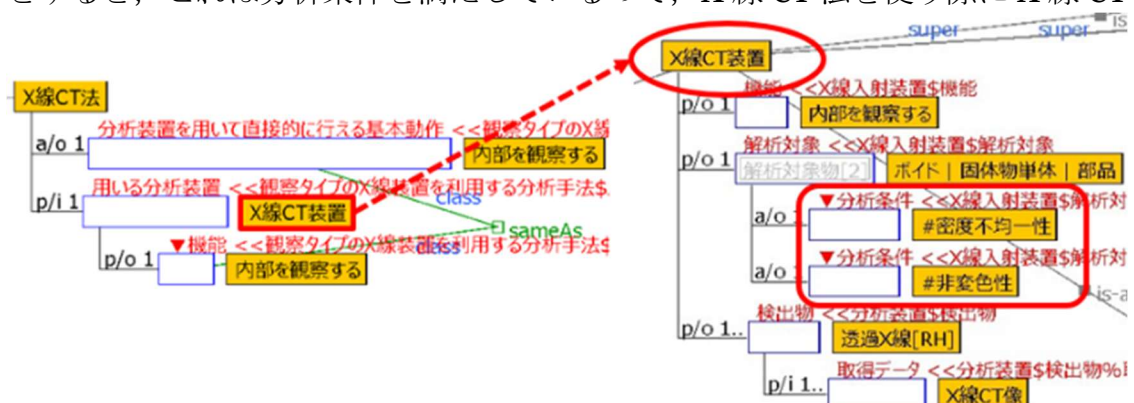


図 6.3 分析条件の確認フロー

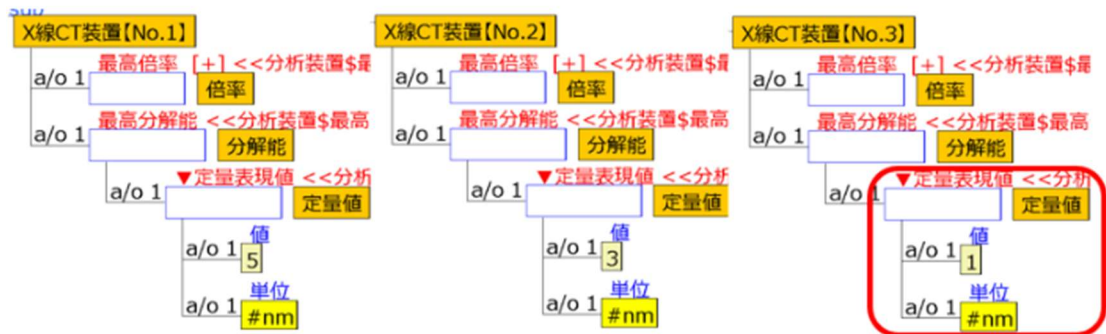


図 6.4 最適な分析装置の選定フロー

装置を用いることができると判断される。

最後に、図 6.4 に示すように、各事業所(No1, No2, No3)の中で最適な分析装置を選定する。今回の条件は「最高分解能が 2nm 以下で十分に観測可能」だった場合とする。この場合では、「X 線 CT 装置」の下位概念である「X 線 CT 装置【No1】」、「X 線 CT 装置【No2】」、「X 線 CT 装置【No3】」の「分解能」スロットを確認する。今回の条件を満たすのは X 線 CT 装置【No3】であるので、最適な分析装置として、「X 線 CT 装置【No3】」が出力される。

以上より、例として示した分析依頼から導き出される最適な分析手法は「X 線 CT 法」、最適な分析装置は「X 線 CT 装置【No3】」となる。

6.2 簡易的な推薦プログラムの実装

本節では、前節で述べたオントロジーの利用イメージを簡易的に実現した推薦プログラムについて述べる。Slack アプリ開発の公式フレームワークである Bolt¹を利用し、ユーザが入力した分析目的を満たす最適な分析手法と分析装置を提示するようなチャットボットを実装した。推薦プログラムでは、扱うデータを Resource Description Framework (RDF)²の形式で表し、そのデータを抽出するような形で実装した。具体的には、構築したオントロジーのデータ(.xml ファイル)を RDF 形式(.ttl ファイル)で出力し、クエリ言語の The SPARQL Protocol and RDF Query Language (SPARQL)³[8]を用いて、分析目的行為に対する最適な

¹ https://tools.slack.dev/bolt-python/api-docs/slack_bolt/

² W3C, RDF 1.1 Concepts and Abstract Syntax, W3C Recommendation 25 February 2014, <https://www.w3.org/TR/2014/REC-rdf11-concepts-20140225/>

³ W3C, SPARQL Protocol for RDF, W3C Recommendation 15 January 2008, <https://www.w3.org/TR/rdf-sparql-protocol/>

 砂田界渡 2分前
開始

22 件の返信

 分析手法推薦ボット アプリ 2分前
1. 分析目的の確認

分析目的を確認します。次の選択肢から選んでください。

結晶方位を測定する_2

粒径を測定する_2

結晶粒子径を測定する

素子の層厚を測定する

部品の寸法を測定する

組成を分析する_2

組成の違いを測定する

元素の有無を確認する_2

空隙率を測定する

組成比を測定する

元素の分散性を測定する_2

試料の断面を観察する

試料の内部を観察する

内部での物質同士の接触を確認する

試料の表面・裏面を観察する

粒子を観察する

結晶を観察する

ポイドを確認する

素子のダレや矩形性を観察する

素子の反り具合_各層厚の傾向_を観察する

部品内部の不具合を確認する

今回の分析目的は

ポイドを確認する

ですね。

図 6.5 分析目的の確認

分析手法と分析装置を出力するプログラムを実装した。

本節も「固体試料の中にポイドが含まれている可能性があり、ポイドの有無を調査したい。」という分析依頼例を使用して、プログラムの操作手順を説明する。図 6.5 に示すように、ユーザが「開始」と入力すると、オントロジーで定義した分析目的行為のリーフノードがすべて提示される。ユーザがこのの中から今回の分析に合致するものを選択すると、図 6.6 に示すように、その分析目的行為の「達成方式」スロットが参照され、達成方式・部分行為、加えてその部分行為を「基本動作」に持つ分析手法が抽出される。今回の例では「ポイドの有無を調査したい」が分析目的なので、分析目的として「ポイドを確認する」を選択すると、断面出し方式とその部分行為を「基本動作」に持つ FIB 加工法・SEM 法・FE-SEM 法が抽出される(内部直接観察方式も同様)。ここで抽出された手法は「適切な手法」であり、ここから今回の分析に必要な分析特徴・分析条件・分解能値を満たす「最適な分析手法と分析装置」を選別する。

ボットから「分析特徴は考慮しますか?」という問いと選択肢が表示されるので、今回の分析に合致する手法に関する分析特徴を選択する。先ほど同様、例え

2. 達成方式・部分行為・分析手法の確認

「ボイドを確認する」は以下の達成方式と部分行為で達成されます。

1. 断面出し方式：

「断面出し方式」は次の部分行為で達成されます。

断面を出す
表面・裏面を観察する

上記の部分行為は次の分析手法によって達成されます。

FIB加工法（断面を出す）
走査電子顕微鏡法（SEM法）（表面・裏面を観察する）
電界放射-走査電子顕微鏡法（FE-SEM法）（表面・裏面を観察する）

2. 内部直接観察方式：

「内部直接観察方式」は次の部分行為で達成されます。

内部を観察する

上記の部分行為は次の分析手法によって達成されます。

X線CT法（内部を観察する）
X線透視法（内部を観察する）

図 6.6 達成方式と部分行為と分析手法の確認

ば「非破壊」で分析しないといけない場合、図 6.7 に示すように、分析特徴に「非破壊性」を選択すると、その特徴を持つ手法(X線CT法・X線透視法)が選ばれ、その手法が用いる装置(X線CT装置・ナノフォーカスX線透視装置)が抽出される。もし分析特徴を考慮する必要がない場合は、「考慮しない」を選択す

3. 分析特徴の確認

次の分析特徴は考慮しますか？

破壊性 非破壊性 定量分析精度低 定量分析精度中 定量分析精度高 +他6件

「非破壊性」を満たす分析手法は次の手法です。

X線CT法
X線透視法

現時点で、上記の手法が最適な分析手法です。

4. 分析装置の確認

X線CT法は次の装置を用います。

X線CT装置

X線透視法は次の装置を用います。

ナノフォーカスX線透視装置

図 6.7 分析特徴の確認

5. 分析条件の確認

分析条件を以下から選択してください。

耐真空性	非ガス発生性	試料ダメージ大	試料ダメージ小	非磁性
導電性	密度不均一性	非揮発性	非変色性	耐熱性

「非変色性」を満たす分析装置は次の装置です。

X線CT装置

ナノフォーカスX線透視装置

分析条件を追加しますか？追加する場合は以下から選択してください。追加しない場合は「考慮しない」ボタンを選択してください。

耐真空性	非ガス発生性	試料ダメージ大	試料ダメージ小	非磁性
導電性	密度不均一性	非揮発性	耐熱性	考慮しない

先の条件に加え、「密度不均一性」を満たす分析装置は次の装置です。

X線CT装置

図 6.8 分析条件の確認

る。

次に、図 6.8 に示すように、ボットから「分析条件を以下から選択してください」とその選択肢が表示されるので、今回の分析に合致する装置に関する分析条件を選択する。6.1 節で例に使用した分析条件（「非変色性」と「密度不均一性」）をもとに、分析条件に「非変色性」を選択すると、その条件を持つ装置（X 線 CT 装置・ナノフォーカス X 線透視装置）が選ばれる。分析条件は 2 つまで考慮することができ、1 つ目の分析条件を選択終了後、ボットから「分析条件を追加しますか？」という問いと選択肢が表示される。ここで「密度不均一性」を選択すると、先ほどの分析条件（非変色性）と選択した条件を持つ装置（X 線 CT 装置）が選ばれる。このとき、分析条件を追加する必要がない場合、「考慮しない」を選択する。最後に、図 6.9 に示すように、ボットから分析に必要な分解能値の入力を求められるので、「1」と入力すると、X 線 CT 装置のインスタンスから「分解能」スロットの値が 1 以下の装置（X 線 CT 装置【No.3】）が抽出される。

以上の推論から、最適な分析手法に「X 線 CT 法」、最適な分析装置に「X 線 CT 装置【No.3】」が提示される。

6. 分解能の確認

今回の分析に必要な分解能の値を**半角数字**で入力してください。



砂田界渡 たった今

1



分析手法推薦ボット アプリ たった今

以下、入力された分解能を満たす分析装置です。

X線CT装置【No.3】

7. 最適な分析手法と分析装置の提示

以上より、今回の分析目的・分析特徴・分析条件を満たす最適な分析手法と分析装置は以下の通りです。

最適な分析手法：X線CT法

最適な分析装置：X線CT装置【No.3】

図 6.9 分解能の確認と最適な分析手法・分析装置の提示

第7章 推薦システムの実装と評価

7.1 推薦システムの説明

本節では、共同研究先で実装され評価された推薦システムについて説明する。推薦システムの形式として、テキスト対話システム(チャットボット)を採用した。依頼者が持つ暗黙的情報を得るために、プログラムとのインタラクションを通じたものにすることが可能であり、それに適しているのは対話方式であるため、Web でよく使われるチャットボットを採用した。

オントロジーを利用したシステムの全体像を図 7.1 に、システムの構成を図 7.2 に示す。ユーザはチャットボットと対話を行う。どのような対話がなされ、対話でオントロジーのどこを参照したのかといったインタラクションは制御プログラムが管理する。制御プログラムはチャットボットとオントロジーの間に立ち、それぞれと通信をしながら、ユーザとの対話に基づいて上位概念から具体的な下位概念に辿ったり、対象とする装置の条件などを取得して必要な選択肢をチャットボットに表示を行うなどの制御を行ったりしている。

データベースには、オントロジー辞書で定義された語彙の同義語や選択肢のエイリアスを格納している。データベースの役割は制御プログラムからオント

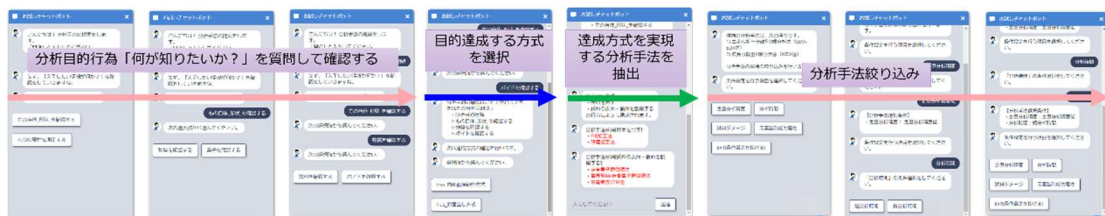


図 7.1 システムの全体像

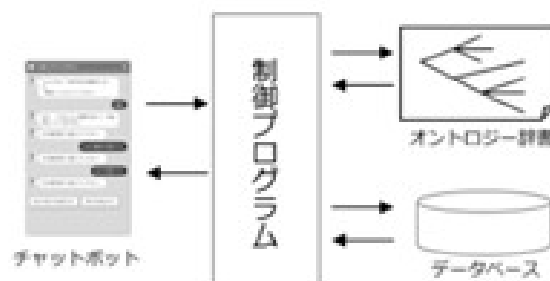


図 7.2 システムの構成

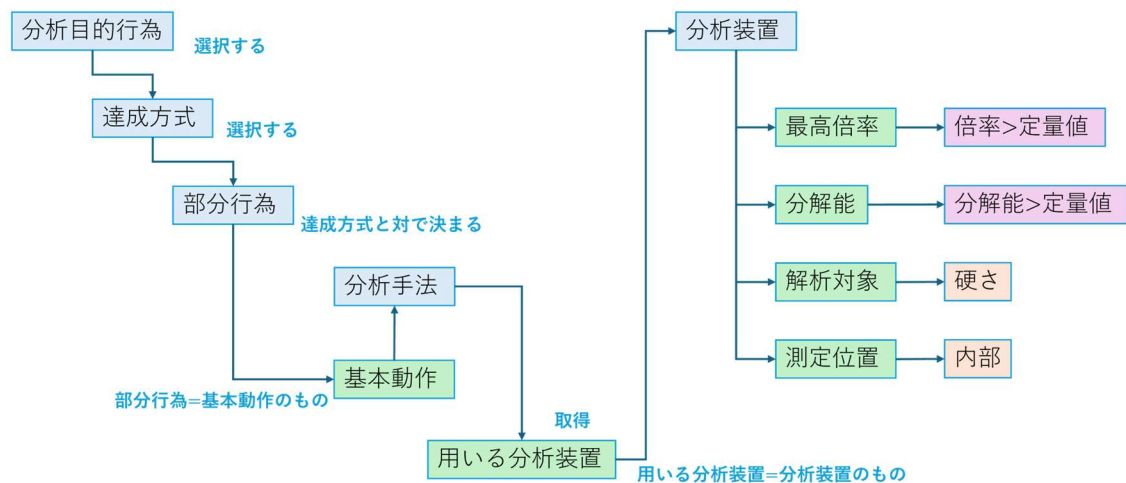


図 7.3 ボットのシナリオ

ロジー辞書の語彙を渡されたときに、同義語やエイリアスを返して、システムで表示される言葉の分かりやすさを補完することでユーザの利便性を向上させるものである。

ユーザが分析手法推薦プロセスで使うシナリオを図 7.3 に示す。このシナリオはオントロジーの構造に基づいて定義されている。ユーザは分析依頼内容に基づき、シナリオに沿ってリレーションを辿り、分析目的を確定する。そしてその分析目的に適合した分析手法と分析装置を絞り込むための条件を提示してもらう。さらにそこから絞り込みを通して提案の手法を選定する。

7.2 推薦システムの利用手順

システムの利用手順を説明する。「エッチング工程でパターン作成を行ったときに残渣が出ているのが見つかった。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。」という例をもとに、推薦システムの利用手順を述べる。

システム起動後、表示された分析目的行為の選択肢の中から今回の分析目的に合致するものを選択する。起動後、最初に表示される選択肢は、「ものの形状を観察する」と「ものの属性を測定する」の 2 つである。ここでの分析目的は残渣の組成を調べることであるが、組成はどのような元素であるかというものの属性であるため「ものの属性を測定する」を選択する。選択後 5 つの選択肢が得られ、ここでは「組成を分析する」を選択する。選択後に「組成の違いを測定する」と「元素の有無を確認する」と「選択終了」の 3 つの選択肢が得られるが、先に選択した「組成を分析する」が適切であるため「選択終了」を選択し、分析

目的行為を確定する。

分析目的行為が確定すると、システムが続けて達成方式の選択肢が表示される。本例では、達成方式は「組成測定方式」のみが表示される。これを選択し、達成方式を確定する。本例では、選択肢として表示される達成方式は1つであるが、3.3.1 項で説明した「ボイドを確認する」のように達成方式が複数ある場合、選択肢に複数の達成方式が表示される。

達成方式が確定すると、組成測定方式を実現するための部分行為が表示される。複数の部分行為を組み合わせて分析目的行為を達成することもあるが、ここではひとつの部分行為だけで「組成を分析する」の分析目的行為を達成できるので、「組成を分析する」だけが表示される。これは「組成を分析する」という行為だけを行うことで「残渣の組成を調べる」ことができるということを示している。ここで達成方式と部分行為が確定する。本例では、表示される部分行為は1つであるが、3.3.1 項で説明した「ボイドを確認する」の「断面出し方式」のように部分行為が複数ある場合、複数の部分行為が表示される。

部分行為が確定すると、システムは分析装置の基本動作に「組成を分析する」という部分行為を持つ分析手法を抽出する。その結果、「エネルギー分散型 X 線分析法(SEM-EDX 法)」、「波長分散型 X 線分析法(WDX 法)」、「蛍光 X 線分析法(XRF 法)」、「誘導結合プラズマ発光分光分析法(ICP-AES 法)」、「誘導結合プラズマ質量分析法(ICP-MS 法)」の 5 つの分析手法が表示される。

ここから分析手法を絞り込む。システムから「質問に教えてください」と表示されるのに引き続き、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。試料は「残渣」と書かれており、ここから試料形態が粉体であることが読み取れるため、試料形態の選択肢から「粉体」を選択する。

次に試料の耐熱性の質問が表示される。試料は 300℃の耐熱性があるかどうかの質問である。試料は無機物であり耐熱性のある試料であることが読み取れるため「(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。候補の装置の属性から「0.1%~」、「0.5%~1%」と「不明」が表示される。分析依頼書には元素の量について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。

絞り込みの質問に対し依頼書から読み取れた内容から回答が行われ、絞り込み条件がすべて揃ったため、絞り込みの質問は以上となる。質問の回答に基づいて絞り込みが行われ、システムは分析手法に「エネルギー分散型 X 線分析法(SEM-

EDX 法)」と「波長分散型 X 線分析法(WDX 法)」を表示し、ユーザに 2 つの分析手法を提案した。この 2 つの方法を提案するのが正しい動作であり、以上で分析手法の絞り込みまで完了した。

7.3 オントロジーとシステムの評価

本節では、評価手順と評価結果について述べる。評価に際して、データベースから分析依頼書を抽出し、システムを使って分析手法と装置の提案をさせ、報告書と突き合わせて提案されたものが適切かどうかを判断するという方法とした。分析依頼書を抽出するにあたって、次の条件とした。まず、オントロジー辞書で定義された範囲内の文書に限定した。例えば、オントロジーで定義していない熱物性の測定や構造解析に関する文書は除外した。また装置まで定義をしていない分析手法が分析に使われるものも除外した。次に、分析部署が行う業務の範囲内とし、例えば組成分析でも外部委託を行ったようなものは評価対象から除外した。また、分析が複数の分析手法(定義された顕微鏡観察と組成分析に関する手法)を採用するケースは評価対象に含めた。最後に、別のサンプルのリピート依頼はサンプルに含まれないようにした。この条件で抽出された文書からランダムに抽出し、システムを用いて評価する。

評価手順は次の通りである。初めに、依頼書から依頼者が入力した項目を読み込む。このとき、文中に分析手法や装置の指定があっても隠して読む。試料の説明なども読み、試料形態であれば有機物・無機物の切り分け、固体や部品、液体などの分類を知るようにし、記述された内容からは無理な推測は行わないこととする。

次に前節で述べたシステムの利用手順に沿ってシステムを操作し、表 7.1 に示す評価項目表に基づいて採点する。基本は、システムで操作し読み取った内容をもとにシナリオをトレースする。ここで、オントロジー辞書の評価に注目をす

表 7.1 評価項目表

分類		項目
前工程 候補の抽出	1.1	必要な分岐・選択肢があるか？
	1.2	選択肢の意味が明確か？（戻ってやり直しが起きなかったか？）
後工程 候補から提案への 絞り込み	2.1	必要な絞り込み項目があるか？
	2.2	適切に絞り込めたか？（明らかに不適切なものが提案に出ていないか）
	2.3	絞り込み条件に不明で答えた後で絞り込みに問題が出ないか？
	2.4	手法が過剰な精度などオーバースペックになっていないか？

るためにプログラムの実装の不備やバグがあった場合は辞書を読み解いて補完するものとする。分析依頼書の依頼側入力から読み取れないものは選択肢から「不明」を選択する。先に進めなくなった(適切な選択肢がない)ときはその次のプロセスの開始点に飛んで以降の評価を行う。評価は問題があった場合にシステムとオントロジーのどちらに起因するものかを明確にするため、それぞれについて実施する。例えば、オントロジーに問題がなくプログラムの不具合により操作等に問題がある場合は、システム側の問題として評価をする。

点数の付け方は次の通りである。評価の点数は各項目 10 点満点とする。ここから、上記手順で操作を行い、その際に発生した不適切な項目数の割合を引いた得点とする。例えば絞り込み項目 5 つが必要だが 1 つ定義が抜けていた場合は、4/5 が適切であったので点数は 10 点満点中 8 点とする。

評価結果を以下に述べる。まず、母数となる分析依頼書の件数、上記の抽出条件で取り出した評価対象の文書件数(M)、サンプル数サイズ(N)を表 7.2 に示す。サンプリングは実際に適用された分析手法で比例層別サンプリングしてからランダムに抽出した。時間の関係もあり、実際に評価したサンプルサイズ(N)は M 数の 1%である。

次に、評価結果を表 7.3 に示す。オントロジーの評価項目ではどの項目も 9.9 点以上と高い得点であり、システムの評価でも 9.5 点以上となっている。システムにはオントロジーがシナリオとして組み込まれているが、双方の点数には大きな乖離がないことから、シナリオの妥当性とオントロジーのシステムへの実装が適切であることを示している。またすべての評価項目で平均得点は 9 点以上であり、候補の抽出（提案）や絞り込みで、過去の分析依頼に対して概ね適切に処理ができているといえる。

表 7.3 評価結果

分類		項目	点数	
			オントロ ジーの評価	システム の評価
前工程 候補の抽出	1.1	必要な分岐・選択肢があるか？	9.99	9.95
	1.2	選択肢の意味が明確か？（戻ってやり直しが起きなかったか？）	9.98	9.75
後工程 候補から提案への 絞り込み	2.1	必要な絞り込み項目があるか？	9.90	9.51
	2.2	適切に絞り込めたか？（明らかに不適切なものが提案に出ていないか）	9.97	9.88
	2.3	絞り込み条件に不明で答えた後で絞り込みに問題が出ないか？	10.00	10.00
	2.4	手法が過剰な精度などオーバースペックになっていないか？	10.00	10.00

7.4 評価結果の考察

システムを使うにあたって、重篤性の高い順で述べる。まず、候補の提案結果に問題あるケースについて、問題点を 2 つ述べる。

問題点の 1 つ目として、分析目的で行き止まりになることがあった。前工程の分析目的行為の絞り込みで、下位概念に落とし込んでいくプロセスにおいて、分析目的行為の「素子を観察する」から部分行為を基本動作に持つ分析手法に辿ることができなかった。

問題点の 2 つ目として、未登録の絞り込み項目があった。例えば、WDX 法では一度に認識できる元素は 5 つであるが、これがオントロジーに登録できていなかった。このため SEM-EDX と WDX のどちらを選択するか判断ができなかった。

次に、本評価実験の前提に照らして提案結果には合理性があるが、操作時に戸惑ったケースを 4 つ述べる。

1 つ目は、誤った選択肢を選び元に戻ってのやり直しが発生したケースである。システムがユーザに提示する選択肢はオントロジーで定義した語彙を使うことが多いため、適切な言葉が無く分かりづらい表記が出てきて、誤ったものを選んでしまうことがあった。例えば、部品・素子・物質という語彙が出てくるが、素子に異物が付着した場合などは、部品なのか、素子なのか迷うところである。

2 つ目は、複数の分析手法を組み合わせるケースである。例えば、表面観察と、その結果で以て組成を調べる場合はそれぞれに対してチャットボットを操作する。表面観察の結果が出るまで組成分析の条件の一部が確定しないため分析手法が絞れないことがあった。

3 つ目は、一次スクリーニングのケースである。SEM-EDX 法は組成分析の一次スクリーニングに使うこともあり、そのような分析手法であるという理解が必要であるが、オントロジーでは定義していなかった。

4 つ目は、論理的な判断と異なるケースである。分析部門は、装置の空き具合やコスト、測定に掛かる時間などを考慮して適切な分析手法・分析装置を提案するため、状況によっては必ずしもロジカルな判断が正しい選択にはならないことがある。

最後に、提案結果に問題は無いが、システムの改善が望まれる点を 2 つ述べる。

1 つ目に、条件による絞り込みの順番が不自然に感じられることがあった。辞

書には順番の定義はなく、提示された分析手法の組み合わせによっても順番は違うので、その定義は一律には決められないが、不自然に感じる場所があった。

2 つ目に、部品・素子・物質などの区別が難しい場合にエイリアスを使って例示を登録し、それを表示する方法を取った方が良いケースがあった。

上述の問題点はオントロジー辞書の構造を変更することなく概念の修正と登録追加で解決できることから、オントロジーの構築とプログラムへの実装はうまく行ったといえる。

7.5 今後の展望

取得したサンプルデータの平均値は 9.910 で、下側 95%信頼区間を計算すると 9.788 であり、評価対象 M でも高い平均値であると考えられる。サンプルデータは得点 10.00 に偏りが大きい傾向がありバイアスの影響の可能性が否定できないが、評価対象 (M) の推定得点平均値から考えると残りもこのオントロジーの定義で適切な処理ができると予想できる。

さらに全体に対しての展望であるが、ここで評価対象としたのは母数 110,028 のうちの 16,603 であり全体の 15%のみである。しかし分析手法提案シナリオや装置の機能や原理などの複雑な構造設計は残りの 85%にも適用可能なものであり、このことから全体のかなりの部分のオントロジーの構造設計は完了している。今後のオントロジー拡張では構造設計が少なく、登録作業が主となるため、15%に対する 85%の比率に比べて大幅に少ない工数でオントロジー構築ができると見込まれる。業務全体をカバーするのに個々の変更事項はあろうが、シナリオ自体は問題なさそうであり、オントロジーで修正・追加等を進めていくことで実務に耐えるシステムになると考える。

第8章 関連研究と考察

8.1 本研究で構築したオントロジーの考察

本研究は、分析目的から最適な分析手法を推薦するためのオントロジー構築において、次の2つの特徴がある。1つ目は、分析目的行為を部分行為に分解し、その部分行為を基本動作に持つ分析手法を出力するように構築したことである。「部分行為」ルールと「基本動作」ルールに入るクラス制約を分析行為としたことで、3.1節で述べた第2の課題であるスケール爆発問題を解決した。2つ目の特徴は、分析特徴と分析条件を考慮して分析手法と分析装置を出力するように構築したことである。分析条件オントロジーの構築と分析装置の分析条件スロットの記述により、3.1節で述べた第3の課題である分析条件の考慮問題を解決し、分析目的が与えられたとき分析条件を結び付けて「最適」な分析装置を推論できることを示した。この2つの特徴を取り入れたオントロジーの構築により、3.1節で述べた第1の課題である分析に関わる語彙が定義や抽象度が不明確である問題を解消し、推薦システムを開発することができた。

8.2 オントロジーを用いた推薦システム

8.2.1 他分野における推薦オントロジー

加藤ら[9]は、日本語 WordNet[10], LinkedGeodata[11], DBpedia[12]といった大規模なデータベースを用いた知識推論を提案している。この研究では、自動車搭乗者が持つ曖昧な個人的要求から具体的な目的地を推薦するためのオントロジーを構築している。例えば、「ライオンが見たい」という曖昧な要求に対して、行動対象オントロジー・サービスオントロジー・施設オントロジーを用いて、最終的に「動物園」を推薦している。具体的には、まず行動対象オントロジーと日本語 WordNet を用いて、「行動=見る」、「行動対象=ライオン」を同定する。次に、サービスオントロジーと施設オントロジーを用いて、「行動=見る」、「行動対象=動物」を満たす施設クラス(動物園)を決定する。最後に、LinkedGeoData, DBpedia を利用して、現在地から近い施設のインスタンスとその情報を出力する。

これにより、オントロジーで適切なクラスを推薦するだけでなく、大規模なデータベースを活用することで適切なインスタンスとその情報まで推薦できる

ため、ユーザに納得感を与える。

本研究は全体行為を分解し、その部分行為を満たす分析手法を適切な手法として出力するものであり、全体行為を直接的に満たす手法を出力するのではなく、分析目的を達成する部分行為に着目して分析手法を推薦するアプローチをとっている。そのため、多様な分析目的(全体行為)の実現に対して部分行為まで掘り下げて推論でき、ユーザは出力された手法がどのようなプロセスを経て導き出されたかを理解しやすくなり、ユーザに更なる納得感を与えることができる。加えて、手法の持つ分析特徴や装置の持つ分析条件を考慮して推論でき、より複雑な推論を可能としている。

この全体行為を部分行為に分解する記述枠組みは、來村らによる先行研究[3], [13]を援用している。文献[3]では、機能と達成方式を分離して記述する枠組みを提案しており、文献[13]では、その記述枠組みを援用し、人間の行為の目的・根拠を明示化するための記述枠組みを提案している。これらの記述枠組みはいずれも、上位ノードに全体／目的行為、下位ノードに部分／手段行為とする木構造で表現されている。本研究でこの記述枠組みを援用したことで、3.1節で述べた第2の課題であるスケール爆発問題の解決や次の8.3.2項で述べる is-a 関係のみの定義による目的一手段関係の不明確問題の解決に繋がったことに加え、なぜそのように推薦するかという根拠を明示的に表現することができた。

8.2.2 オントロジーを用いたチャットボットシステムの開発

Zubaide ら[14]は、オントロジーを用いたチャットボット(OntBot)を開発している。このシステムでは、ユーザからの入力に対して、オントロジーデータがマッピングされた知識データベースと自然言語モジュールと推論エンジンを使用して出力している。様々なドメインに対応しており、データベースから SQL を使用して解を出力している。

対話システムはタスク指向型対話システムと非タスク指向型対話システムの2種類に分類することができる。OntBot は雑談のような自由な会話を行うものなので、非タスク指向型対話システムに該当するのに対し、本共同研究で開発された推薦システムは、達成すべき特定のタスク(最適な手法の推薦)を持つため、タスク指向型対話システムに該当する。加えて、本システムはシナリオ型チャットボットにも該当し、選択肢を選ぶだけで回答が得られ、比較的安いコストで開発することができる。

8.3 他分野における分析手法の定義

8.3.1 RadLex

放射線分野において、北米放射線学会が放射線科領域に特化した用語集“RadLex”の作成を進めている[15]。ここ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。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、主に観察を行う“Computed Tomography(CT 法)”や測定を行う“Spectroscopy(分光法)”などが定義されている。また、自然言語文によって概念の意味が定義されているものもあり、例えば、“Computed Tomography”は自然言語文では“Tomography using x-ray transmission and a computer algorithm to reconstruct the image.(X 線透過とコンピュータアルゴリズムを使用して画像を再構成する断層撮影)”と定義されている。

RadLex では統一された語の提供を行うが、機器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」などの経験者が知り得る機器の特徴も重要である[16]。

その点、本研究では、「入射物」スロットに入るクラス制約を放射線や化学物質と定義する他、「基本動作」ロールに入るクラス制約を分析行為と定義し、分析手法を体系的に定義した。これにより、分析手法を参照すると、その分析手法が使用する媒体やその分析手法が行うことのできる内容、分析結果の形態と内容を得ることができる。

8.3.2 SNOMED-CT

SNOMED-CT は、医学用語を統一的に扱い表記を統一することを目的に、1999 年米国病理学会が定めた病理疾病分類 SNOMED をもとに、英国病院用の医療用語集 United Kingdom’s Clinical Terms Version 3(Read Code)、MesH(米国国立医学図書館科学用語集)などを統合して作成された用語集である[17]。概念としての各分析手法は“Procedure(処置)” - “Procedure by method(手法を用いた処置)” - “Evaluation procedure(評価に関する処置)” - “Imaging(画像診断)”の下位概念に定義されており、主に対象部位の画像検査を行う手法と特定の技術を利用する手法が定義されている。また、“Imaging”の下位に“Radiographic imaging procedure(放射線を用いた画像診断手法)”が定義されており、この下位概念には、主に観察を行う“Computed Tomography(CT 法)”や測定を行う“X-

ray photon absorptiometry (X 線光子吸光測定法)” が定義されている。

SNOMED-CT はターミノロジーとして発展してきたため、オントロジーとして見た場合、様々な課題が指摘されている[17][18]。一例を挙げると、目的と手段の関係が is-a 関係で記述されているため、混乱を招く記述がされている。例えば、上述の “Imaging(画像診断)” is-a “Evaluation procedure(評価処置)” の部分は、画像診断によって「評価」を目的として達成できるということを表していると考えられる。本研究では、推論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ため、分析目的に関する行為(全体/目的行為)とその目的を達成する行為(部分/手段行為)を分けて、ロール概念という基盤概念を用いて、記述する。SNOMED-CT の上述の is-a 関係は、目的-手段関係を is-a で表現しており、表現が十分ではなく区別が付かないため、推論時に混乱を招く記述となってしまう。

また、中間概念が豊富ではなく、用語の平行な列挙に近い構造になっている。例えば、“Radiographic imaging procedure” の下位概念には、X 線を照射して透過像を得る “CT 法” と、膀胱内に造影剤を入れて X 線撮影を行う “Pneumocystogram(膀胱造影法)” が平行に列挙されており、放射線の種類による分類と、対象臓器の種類による分類が区別されていない。つまり、オントロジカルな概念体系になっておらず、知識の再利用がしづらい構造になっている。

その点、本研究では、オントロジーエディタの「法造」を使用して、ロール概念と is-a 関係を明示的に記述することに加え、概念を意味的に分類した。これにより、知識の再利用を視野に入れた体系的な概念構造を構築することができた。特にロール概念を用いて部分行為への分解を明示的に記述することで、前述のように記述量の爆発的増加を防ぎ、記述量を 55%削減することができた。

8.3.3 Measurement Method Ontology (MMO)

生物医学分野では、表現型測定データを統合する必要性が高まっており、その中で「どのように測定したのか」に関する用語を標準化した Measurement Method Ontology¹が開発されている[19]。“in vivo method(生体内法)” と “ex vivo method(生体外法)” という 2 つの主要な概念があり、用語としての各分析手法

¹ <https://bioportal.bioontology.org/ontologies/MMO>

はどちらかの下位概念で定義されている。例えば，“computed tomography(CT法)”は“in vivo method” - “in vivo radiography(生体内放射線検査)” - “tomography(断層撮影)”の下位概念で定義されている。

Measurement Method Ontology は、多くの分析手法が網羅的に定義されているが、その分析手法が使用する媒体(放射線)や基本動作で分類されておらず、使用技術ごとに平行に定義されたターミノロジーとなっている。そのため、SNOMED-CT と同様、体系的な概念構造になっておらず、知識の再利用がしづらい構造になっている。

その点、本研究では、8.3.1 項で述べたように、分析手法を「使用媒体(放射線)」、「基本動作」、「分析結果」などの情報を含めて体系的に定義した。これにより、中間概念が豊富になり、知識の再利用を視野に入れた体系的な概念構造を構築することができた。

8.3.4 The Chemical Method Ontology (CHMO)

The Chemical Method Ontology¹とは、分析化学用語集(IUPAC Orange Book²)で確立された定義をもとに構築されたオントロジーである。非常に多くの分析手法が定義されているため、分析手法の多くを網羅している。図 8.1 に示すよう

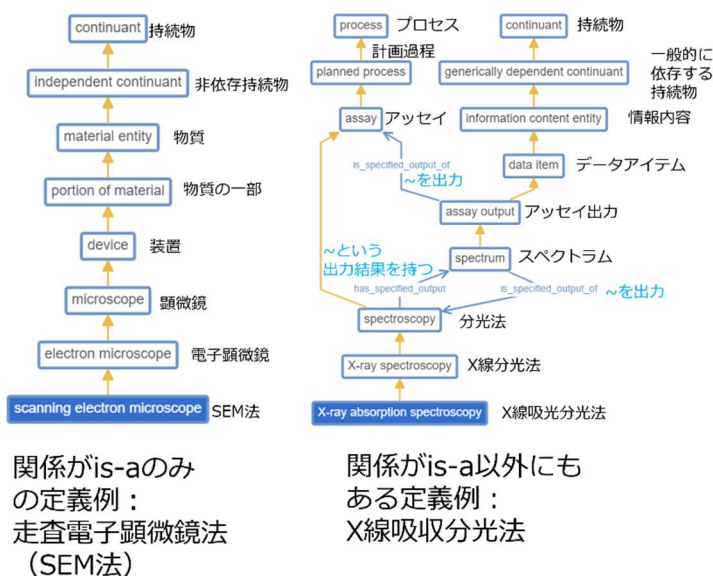


図 8.1 CHMO における分析手法の定義

¹ <https://github.com/rsc-ontologies/rsc-cmo>

² https://media.iupac.org/publications/analytical_compendium/

に，一部の分析手法は is-a 関係だけでなく，“is_specified_output_of”や“has_specified_output”などの関係を用いて定義されているものもあるが，基本的に多くの分析手法は各概念を is-a 関係のみで定義されており，その他の関係を用いた概念定義がそれほど多く提供されていない。

その点，本研究では，8.3.1 項で述べたように，分析手法を「使用媒体(放射線)」，「基本動作」，「分析結果」などの情報を含めて体系的に定義した．CHMO が基づく BFO が定義する”information content” は，2.3 節で述べた，本研究が基づく YAMATO が定義する”表現の内容”によって明確に定義されている．これにより，各分析手法からクラス制約を参照するだけで様々な情報を取得でき，多くの情報を提供することができる概念体系を構築することができた。

8.3.5 The Chemical Analysis Metadata Platform (ChAMP)

The Chemical Analysis Metadata Platform¹とは，機器分析化学に関する上位概念を提供しているプラットフォームである．ここで定義されているプラットフォームは XML で記述されており，分析手法よりも上位概念を定義しているため具体的な分析手法の定義は含まれない．図 8.2 に“techniqueType(機器に関する情報)”の定義に必要な概念を示す．この例では，「機器に関する情報の定義には製造元やモデル No などの概念が必要である」ということを示している．このように，ChAMP では分析化学に関する上位概念に必要な概念を提供している．しかしながら，一般的な概念を提供しているため，本研究のような推薦システムを開発する際にそのような概念は不必要である場合があり，また推薦システムに



- ①製造元 ②モデルNo ③シリアルNo ④ソフトウェア名
⑤ソフトウェアバージョン ⑥OS ⑦OSバージョン
⑧アクセサリ ⑨構成物 ⑩設定

図 8.2 ChAMP における概念定義

¹ <https://champ-project.org>

必要な概念を含んでいない場合がある。

その点、本研究では、推薦に必要な概念を考え、それをもとに分析手法を体系的に定義した。それにより、分析目的が与えられたとき分析手法と分析装置の条件を結び付けて、最適な分析手法を推薦することができるオントロジーを構築した。

8.4 共同研究で開発された推薦システムの位置づけと特徴

Liu ら[20]によると、ナレッジグラフを用いた推薦の種類として、1)オントロジーベース、2)Linked Open Data ベース、3)ナレッジグラフ埋め込みベースの3種類があると述べられている。共同研究で開発された推薦システムは、法造で構築したオントロジーや、それを RDF 変換した Linked Open Data 形式のデータを取り入れているので、1)と 2)の領域に該当すると考えられる。

Naqvi ら[21]は、製造業分野でのオントロジーベース XAI (O-XAI) の研究を多数報告しており、例えば、Rožanec ら[22]による、製造業における XAI と意思決定をサポートするナレッジグラフの研究や、Confalonieri ら[23]による、オントロジーを使用した決定木の抽出・解釈の研究を報告している。本研究で開発された推薦システムも、分析目的から明示的な論理的定義に基づいて分析手法を出力しており、製造業分野での O-XAI の一例に該当すると考えられる。

情報推薦システムには、内容ベースフィルタリングと協調フィルタリングがある[24][25]が、共同研究で開発された推薦システムを情報推薦システムとみると、前者に該当すると考えられる。しかし、構造を明示的に与えており、特徴ベクトルによる比較[25]は行っていない。

近年、大規模言語モデルを用いた推薦システムの開発[26]が行われているが、本研究はオントロジーを用いて推薦システムを開発した。大規模言語モデルを分析依頼文書を学習対象として構築した場合、目的や条件が未整理で記述されているため、ある条件について手法全てに網羅的に書かれている保証がなく、誤った推薦結果を出す可能性がある。その点、本研究で分析目的・分析行為・分析条件を体系的に定義したことで、中間層に分析行為を挟むことで、記述量を抑えながら、最適な分析手法を推薦することができる。また、大規模言語モデルにオントロジーの定義を RAG[27]として与えることによって、正しい解を出力できる可能性があるが、本研究のオントロジーの意義は変わらず、システム実装上のアプローチの違いと言える。

第9章 おわりに

本研究では、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に組み込むことを想定したオントロジーを構築した。そして、共同研究先企業によってオントロジーを組み込んだ推薦システムが開発され、オントロジーとシステムの評価が行われた。両者ともに得点平均点が 9.9 点（10 点が満点）と高得点であり、過去の分析依頼に対し、概ね適切に処理することができた。また、この結果から、本研究で構築したオントロジーの修正・追加等を進めることで実務に耐えるシステムになると考える。

本研究の貢献は以下の 2 点である。

分析依頼目的・分析手法・分析条件に関するオントロジーの構築

上記の 3 つのオントロジーを構築した。また、分析手法に「基本動作」スロットを定義したことで、分析目的と分析手法を一対一対応で記述する方式と比べ、分析手法に関するクラス数とスロット数の合計記述量を 55%削減でき、記述量の爆発の課題を解決した。

語彙と利用プロセスの考察による推薦システム開発への貢献

抽象概念の体系的な定義により、分析目的が与えられたとき分析手法の特徴や分析装置の条件を結び付けて、最適な手法を推薦するプロセスを考察することができ、オントロジーを組み込んだ推薦システムの開発指針を提供した。

今後の課題として、分析行為の「加工する」の下位概念の拡充が挙げられる。現状では、「観察する」と「測定する」の下位概念は充実しているが、「加工する」の下位概念は「断面を出す」行為しか定義していない。分析依頼には前処理や後処理で加工行為を伴う場合があるので、今後はその加工行為を「加工する」の下位概念に定義したり、その加工行為を定義済みの分析目的行為の部分行為に追加したりして、より多くの分析依頼に対応できるようする必要がある。加えて、実務に耐えるシステムとなるよう、評価対象文書として使用しなかった残り 85%の文書に対応するオントロジーの作業登録を進めていく必要がある。

謝辞

本研究を行うにあたり，熱心なご指導，ご助言を賜りました指導教官の村上陽平教授に深謝申し上げます．4月からの再配属から約1年，研究に関するご助言をたくさん頂き，新しい知見や考え方を学べました．研究で行き詰った際には，非常に鋭いご指摘をいただき，新たな視点で研究の進め方を見直す貴重なきっかけを与えていただきました．村上教授や研究室の皆様とともに楽しく研究できたので，再配属先に村上研を選んだことは，私にとって最良の選択だったと感じています．

加えて，丁寧なご指導，ご鞭撻をいただいた來村徳信教授にも深く感謝いたします．來村研に所属したことで「オントロジー」「セマンティック技術」について深い知見が得られ，AI分野における研究に非常に関心を持ちました．私自身オントロジーの構築は没頭してしまうほど非常に楽しく，約3年間非常に楽しい研究ができたと感じております．また，産学連携の研究として，現場で得られたリアルな知識をもとにオントロジーを構築し，それを活用したシステム開発から評価まで行ったことで，オントロジーが実社会でどのように役立つのかを深く理解することができました．このような実践的で有意義な研究に取り組めたことを大変嬉しく思います．今後，このオントロジー技術は重要になると考えておりますので，これからも勉強して最先端の知識を得ることができればと思います．

また，本研究は（株）村田製作所との共同研究の一部として行われたものであり，（株）村田製作所 技術・事業開発本部 共通基盤技術センター設計プロセス開発部 板倉修一様には，多くの専門的知識をご教授頂くとともに，オントロジーの概念要素の体系化と利用について有意義な議論をさせていただきました．これらの経験は私の研究を一段と深める契機となると同時に，社会に出た際，企業の方々との打ち合わせにおける議論の進め方や意見交換の在り方について多くを学ぶ貴重な機会となりました．深謝申し上げます．

さらに，ナレッジコンピューティング研究室と社会知能研究室の皆さまにも感謝の意を表します．ナレッジコンピューティング研究室の皆様には，研究に行き詰まった際に親身になって相談に乗っていただき，また時には楽しい談笑を交わすことで，大変励まされました．社会知能研究室の皆様には，再配属当初は緊張しましたが，温かく声をかけていただいたおかげで，その後の研究生活をと

でも充実して過ごすことができました。研究だけでなく、学びの場としても豊かな時間を過ごせたことに感謝しております。

最後に、このような貴重な学びの場を提供してくださった指導教官の先生方をはじめ、(株)村田製作所の共同研究に多大なご尽力を賜った板倉様をはじめとする関係者の皆さま、研究室の皆さま、そしてご協力いただいた全ての方々に心より感謝申し上げます。そして、私の家族である、砂田祐二、百世、乃愛には、修士課程まで学業面や課外活動などにおいて、たくさんサポートいただきました。深謝申し上げます。

参考文献

- [1] 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, 17巻, 3号, pp.196-208 (2002).
- [2] 古崎晃司, 來村徳信, 笹島宗彦, 溝口理一郎 (著), 溝口 理一郎 (編): オントロジー構築入門, オーム社 (2006).
- [3] 來村徳信, 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).
- [4] 溝口理一郎 (著), 人工知能学会 (編): 知の科学 オントロジー工学, オーム社 (2005).
- [5] 加藤文彦, 川島秀一, 岡別府陽子, 山本泰智, 片山俊明: オープンデータ時代の標準Web API SPARQL. 株式会社インプレスR&D (2015).
- [6] Mizoguchi, R., Borgo, S., YAMATO: Yet-another more advanced top-level ontology, Applied Ontology, Vol.17, No.1, pp. 211-232 (2022).
- [7] 一般財団法人材料科学技術振興財団, 分析手法カタログ Ver.7, 2017 年 11 月発行号
- [8] 加藤文彦, 川島秀一, 岡別府陽子, 山本泰智, 片山俊明: オープンデータ時代の標準 Web API SPARQL, 株式会社インプレス R&D (2015).
- [9] 加藤文彦, 小出誠二, 武田英明, 落合勇太, 上田建揮: オープンなデータベースを利用した行動計画提案に関する研究, 人工知能学会全国大会論文集, 名古屋, 1N2-OS-39a-2in1 (2017).
- [10] F. Bond, H. Isahara, S. Fujita, K. Uchimoto, T. Kuribayashi: Enhancing the Japanese WordNet, ALR7 Proc. the 7th Workshop on Asian Language Resources, pp. 1-8, Association for Computational Linguistics. pp. 1-8 (2009).
- [11] Claus Stadler, Jens Lehmann, Konrad Höffner, Sören Auer: LinkedGeoData: A Core for a Web of Spatial Open Data, Semantic Web Journal (2012).
- [12] 加藤文彦: DBpedia の現在: リンクトデータ・プロジェクト, 情報管理, 60 巻, vol.60, no.5, pp.307-315 (2017).
- [13] 來村徳信, 中條亘, 笹嶋宗彦, 師岡友紀, 辰巳有紀子, 荒尾晴恵, 溝口理一郎: 行為知識の状況適応的な目的指向構造化と看護における応用, 人工知能学会論文誌, Vol.36, No.4, p.D-K94 1-16 (2021).

- [14] H. A. Zubaide, A. A. Issa: OntBot: Ontology based chatbot, Proceedings of International Symposium on Innovations in Information and Communications Technology, pp.7-12 (2011).
- [15] Langloz CP. : RadLex: a new method for indexing online educational materials. Proceeding of Radiographics, Vol.26, No.6, pp.1595-1597 (2006).
- [16] 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).
- [17] 藤田伸輔, 今井健: SNOMED-CT と ICD-11 に見る医学・医療分野の Ready to Use Ontology, 人工知能学会誌, 25 巻, 4 号, pp.501-508, (2010).
- [18] Schulz, S., Suntisrivaraporn, B., Baader, F.: SNOMED CT's problem list: ontologists' and logicians' therapy suggestions, Stud, Health Technol. Inform., Vol. 129, Pt 1, pp.802-806 (2010).
- [19] Shimoyama M, Nigam R, McIntosh LS, Nagarajan R, Rice T, Rao DC, Dwinell MR.: Three ontologies to define phenotype measurement data, PMID: 22654893; PMCID: PMC3361058 (2012).
- [20] C. Liu, L. Li, X. Yao and L. Tang.: A Survey of Recommendation Algorithms Based on Knowledge Graph Embedding, Proceedings of 2019 IEEE International Conference on Computer Science and Educational Informatization (CSEI), pp.168-171 (2019).
- [21] Naqvi, M.R., Elmhadi, L., Sarkar, A., Archimede, B., Karray, M.H.: Survey on ontology-based explainable AI in manufacturing, Journal of Intelligent Manufacturing (2024).
- [22] Rožanec, J. M., Zajec, P., Kenda, K., Novalija, I., Fortuna, B., Mladenčić, D.: XAI-KG: knowledge graph to support XAI and decision-making in manufacturing, Proceedings of In International Conference on Advanced Information Systems Engineering, pp.167–172 (2021).
- [23] Confalonieri, R., Weyde, T., Besold, T. R., del Prado Martín, F. M.: Using ontologies to enhance human understandability of global post-hoc explanations of black-box models, Proceedings of Artificial Intelligence, Vol.296, 103471 (2021).
- [24] 神嶋 敏弘: 推薦システムのアルゴリズム(1), 人工知能学会誌, 22 巻, 6

号, pp.826-837 (2007).

[25] 神島 敏弘: 推薦システムのアルゴリズム(2), 人工知能学会誌, 23巻, 1号, pp.89-103 (2008).

[26] L. Wu, Z. Zheng, Z. Qiu, H. Wang, H. Gu, T. Shen, C. Qin, C. Zhu, H. Zhu, Q. Liu, H. Xiong and E. Chen: A Survey on Large Language Models for Recommendation, arXiv preprint, arXiv:2305.19860, 2023.

[27] Patrick Lewis, Ethan Perez, Aleksandra Piktus, Fabio Petroni, Vladimir Karpukhin, Naman Goyal, Heinrich Kuttler, Mike Lewis, Wentau Yih, Tim Rocktaschel, Sebastian Riedel, and Douwe Kiela: Retrieval-augmented generation for knowledge-intensive NLP tasks, In Advances in Neural Information Processing Systems, Vol. 33, pp. 9459–9474. Curran Associates, Inc, 2020.

付録 オントロジーの全体像

