

材料ファクトデータベースから得られる XML 記述の知見ノート Knowledge-Note Obtained Using XML from Materials Factual Database

藤田 充苗^{*,†} 徐 一斌^{*} 加治 芳行[‡] 塚田 隆[‡]
小野瀬 庄二[§] 益子 真一[¶] 芦野 俊宏[¶]

Mitsutane FUJITA Yibin XU Yoshiyuki KAJI
Takashi TSUKADA Shoji ONOSE
Shinichi MASHIKO and Toshihiro ASHINO

物質・材料研究機構 (NIMS と以下略), 日本原子力研究所 (JAERI), 核燃料サイクル開発機構 (JNC), 科学技術振興事業団 (JST) の 4 機関が共同して, インターネットから相互利用可能な分散型材料データベースシステム (以下, データフリーウェイと言い DFW と略す.) の開発を進めてきた. DFW のようなデータベースでの検索結果は, 一般に必要なデータ項目に関する数値や文字列が表やグラフで表示される. これらの結果やデータ解析からの新しい知見を知識として格納し, その知識から逆にその根拠となるデータの検索ができれば, 材料データベースの高度な利用が可能になる. しかも, その知識を収集し, 知識ベースが構築できればさらに新たな知見の生成が期待できる. 本論文では, 本システムとリンクしている DFW の現状を述べ, そのデータベースの検索結果から得られる知識を知見ノートとして XML で記述し, 知識の 1 つの要素として整理を行う方法を示し, 材料分野の知識としての知見ノートから新たな知見を得るためのデータ加工の活用例を示す.

The distributed material database system named 'Data-Free-Way', (DFW) has been developed by four organizations, (the National Institute for Materials Science, the Japan Atomic Energy Research Institute, the Japan Nuclear Cycle Development Institute, and the Japan Science and Technology Corporation) under a cooperative agreement in order to share fresh and stimulating information as well as accumulated information for the development of advanced nuclear materials, for the materials design, etc.

In order to create additional values of the system, knowledge base system, in which knowledge extracted from the material database is expressed, is planned to be developed for more effective utilization of DFW. XML has been adopted as the description method of the retrieved results and the meaning of them. One knowledge note described with XML is stored as one knowledge which composes the knowledge base. Since this knowledge note is described with XML, the user can easily convert the display form of the table and the graph into the data format which the user usually uses. This paper describes the current status of DFW, the description method of knowledge extracted from the material database with XML, handling of numerical data in the knowledge and the distributed material knowledge base system.

キーワード: 材料ファクトデータベース, データフリーウェイ, 知見ノート, XML
Materials Factual Database, Data-Free-Way, Distributed, Knowledge Note, XML

* 物質・材料研究機構

National Institute for Materials Science

† FUJITA.Mitsutane@nims.go.jp

‡ 日本原子力研究

Japan Atomic Energy Research Institute

§ 核燃料サイクル開発機構

Japan Nuclear Cycle Development Institute

¶ 東洋大学, Toyo University

1 はじめに

物質・材料研究機構, (NIMS と以下略), 日本原子力研究所, (JAERI), 核燃料サイクル開発機構, (JNC), 科学技術振興事業団, (JST) の4機関が共同して, インターネットから相互利用可能な分散型材料データベースシステム, (以下, データフリーウェイと言い DFW と略す.) の開発を進めてきた. 平成15年度から JST が構築したデータベースは NIMS に移管され, 現在3機関が共同して分散型知識ベースの開発を行っている. すなわち, 材料データベースの検索では, 検索結果を表やグラフで表示され, その意味することに関しては言及しないのが一般的であり, 専門家にとってはこのような機能のみで十分である. しかし, 検索結果の意味することやさらなるデータ解析の意味することを知識として格納し, その知識からファクトデータの検索ができれば, データベースの利用がより容易となる. しかも, その知識を収集し, 知識ベースとなれば新たな価値の生成が期待できる. ここでは, DFW の現状とデータ検索結果を XML で記述した知見ノートの作成を試み, その機能について述べ, さらに材料分野の知識としての知見ノートから新たな知見を得るためのデータ加工の活用例を示す.

2 データフリーウェイの現状

2.1 概要

原子力用材料は中性子照射, 高温, 過酷な腐食あるいはそれらが重畳される環境下で使用されることが多い. したがって, 材料探査・設計や材料の破壊現象の解明を行う場合, 多方面からの検討が必要である. それには, 巨大な材料データベースが必要であり, ここから得られる材料情報を整理格納した知識ベースの支援により, 原子力材料の諸問題の解決がより効率的に図れる. 巨大な材料データベースの構築は, 1つの研究機関では困難であるので, NIMS (<http://dfw.nims.go.jp/>), JAERI

(<http://jmpdpcda.tokai.jaeri.go.jp/>), JNC (<http://dfw.jnc.go.jp/>), および JST の各機関が得意分野の材料データベースをそれぞれで構築し, それらのデータベースを相互にインターネットを介して利用できる分散型材料データベースの開発を行ってきた^[1-5].

2.2 格納データ

現在, 3機関における基盤原子力材料研究で得られたデータ及びそれらの参考になるデータを主体に約 16,000 試験片分のデータと参考となるデータ約 20,000 レコードを格納した. さらに, データベースから検索した数値データ間の相関関係を検討するためのグラフ作成及び応用プログラムが動作可能な環境を整備した. また, 数値データに付随する画像データの格納・検索が数値データと同様に取り扱える環境を整備したほか, 材料の破壊現象の解明を容易にする各種の予測計算ツールの整備を行っている^[6].

2.3 利用について

利用者は, 3機関のいずれかで利用登録を行い, データベースにアクセスすれば, 3機関が格納しているデータの存在機関を意識することなく利用できる. しかも, その機関のデータベースでは得られないかもしれないデータの検索が可能である.

DFW ではデータ検索に2つの方法を用意している. 必要とする検索項目をあらかじめ組みにした定型検索と検索項目を選択できる汎用検索が行える画面を用意している. 当面は定型画面を公開することにしてはいる.

3 材料データベースからの知識表現^[7]

3.1 知識ベースシステムの概要

DFW からデータ検索で得られた結果を知

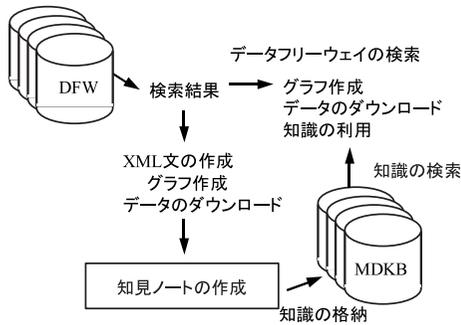


図1 DFWのデータ検索と知見ノート作成機能と知識ベースの関係

見として示し、その知見から格納データの詳細を検索できれば、無駄な試行錯誤の検索が必要なくなる。さらにデータ検索前に、データベースに如何なるデータが格納されているかを知ることでもできる。図1にDFWの検索結果、知見ノート作成機能と知識ベースの関係の概念図を示す。各機関の専門家は、分散型ファクトデータベース、(DFW)を用いて、それぞれの分野に適応したデータの検索、グラフの作成及びデータの評価・解析を行い、新たな知見が見いだされた場合には、これに知見情報等を付け加えた知見ノートを作成する。知見ノートには、後述するように単に知見のみならず、これを得るに至った専門家の探索手順も記録されている。この知見ノートをそれぞれのサイトに登録・保存し、知識ベース管理システムを通してユーザーの検索・閲覧に供する。ここでは1つの知見ノートは知識ベースを構成する1つの知識として格納される。これにより、専門外のユーザーでもその手順を追うことにより、試行錯誤することなくその分野に精通した専門家と同様の探索を行うことが可能となる。

図2に知識ベースシステムの主な流れを示す。導入画面としての知見ノート画面において、①新規作成、②テンプレート、③知見ノート検索、④知見ノート編集の機能を選択することができる。知見ノートを新規作成する場合、データフリーウェイの既存画面を利用し

て検索条件を設定、(検索条件設定画面)し、検索結果、(数値データ)を表示する、(検索結果画面)。ここまでの結果あるいは数値データをグラフ表示した、(グラフ表示画面)後で、知見ノートを作成する、(知見情報登録画面)ことができる。ここでは、知見タイトル、知見者、検索内容、検索結果から得られた知見、知見記載文献等を入力することができる。知見情報登録画面で登録ボタンを押すことにより、知見ノートファイルとして、知見情報、検索条件及び検索結果をXML形式で、グラフをSVG、(Scalable Vector Graphics)形式で保存する。テンプレートを使用する場合、テンプレート選択画面でこれまで知見ノートファイルに保存されてきた検索条件及び検索結果を呼び出し、それを基に新たな検索を行ったり、新たなデータ整理、(グラフ表示)を行ったりすることができる。この機能により、類似の検索を行う場合の手間が省け、データ検索の効率が上がるものと考えられる。知見ノート検索を行う場合、知見ノート一覧画面でこれまでに蓄積された知見ノートのタイトル一覧の中から必要なものを選択することにより、Webブラウザで表示することができる。同様に知見ノートを編集する場合は、知見ノート一覧画面で該当する知見ノートを選択し、知見ノート編集画面で知見情報の修正等を行い、再登録することができる。

上記のように、開発した知識ベースシステムとファクトデータベース、(DFW)がリンクしていることにより互いに補完して、材料現象解明、材料探査、新材料創製などの諸問題をより効率的に解決できるシステムである。

3.2 知見ノート作成と表示、編集、加工の機能

図3に知見ノート作成(a)、作成したノートの一部(b)を、このような知見ノートの表示、編集や加工を行うための入り口画面(c)および知見ノートの加工画面(d)を示す。知見ノートはDFWのデータ検索、検索結果の表

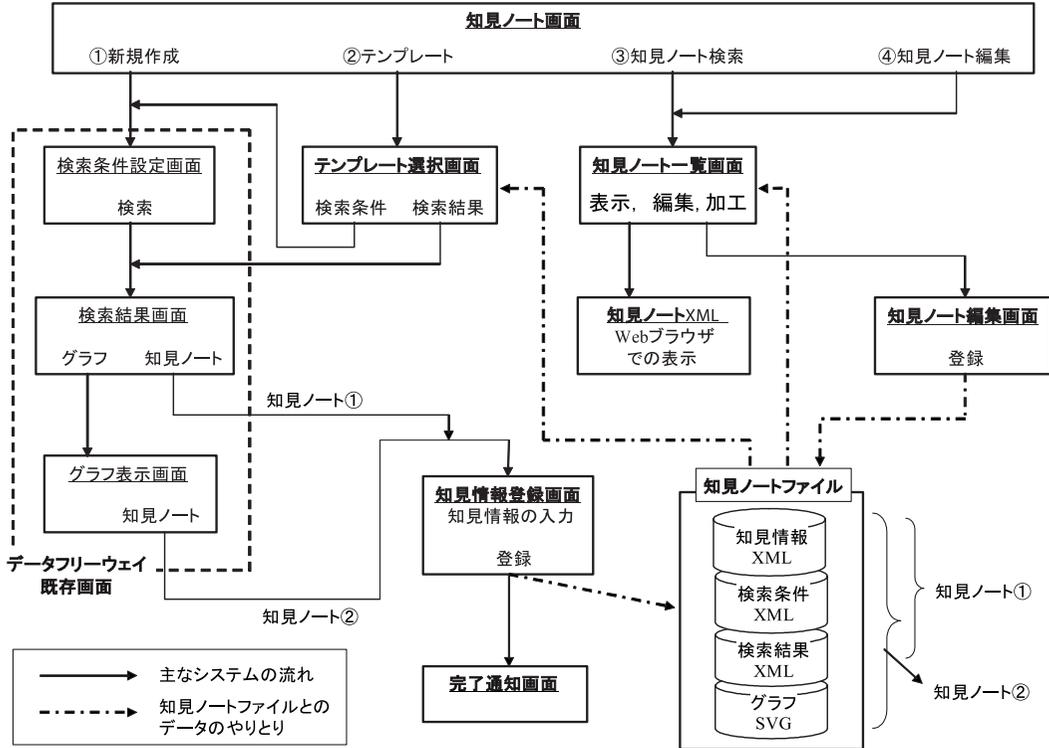


図 2 材料データベースとリンクした知識ベースシステムの流れ



図 3 知見ノート作成機能。表紙画面 (a)、作成した知見ノートの一部 (b)、知見ノートの編集・加工ボタン (c)、データ加工画面 (d)

示あるいはグラフ作成のそれぞれの操作段階で作成でき、それぞれの段階での設定条件がこのノートから再現できる。さらに、このノートが知識として一定の書式を具備させた。すなわちデータ検索結果から得られる知見には、データ検索結果を表で表示する際のデータ項目をタグとしXMLで記述し、XSLを用いて知見と検索データを表示できるようにした。

3.3 知見ノートの記述事項

現在、DFWのデータ検索・表示過程において生成できる知見ノートの例を図4に示す。知見ノートは、知見タイトル、記入者、日付、検索内容、知見、知見記載文献などの項目についての記述と検索結果の表やグラフで構成されている。知見情報、データ検索条件、検索結果及びグラフ表示からなる知見ノートの例を図4示す。これは、3機関が所有する引張試験データを検索し、検索結果から得られる知見を加えて、作成した知見ノートをWebブラウザにより表示させたものである。このような一連の知見情報及びその根拠となるデー

タ等を一括して、1つの知識として内容を代表する表題をつけ、各機関で蓄積していくことになる。利用者は、表題から関連知見ノートを選択でき、また知見ノートに記載されていない項目について、データ検索をファクトデータベースに対して再度行うことが可能である。

図5に、知見ノートのXMLとXSLの記述例を示す。このXMLはXSLを用いて図4のような知見ノートの表示を行うことができる。このXMLには、まずDFWのデータを検索する際の検索項目や検索条件を表すタグの例、次に検索結果を検索項目と単位を表し続いて検索されたデータを表すタグの例、そしてグラフ作成のためのデータ点の表示記号とX,Y軸のラベルを表すタグの例、最後に検索結果から得られた知見を表すタグの例が示されている。XMLの表示順序は、DFWからデータを検索しその結果をグラフに表示する順序であり最後に知見を記述するように作業順になっている。しかし、XSLでの表示は、最初に知見を表示し、その後作業順に表示するようにした。DFWから得られる知見をXMLで記

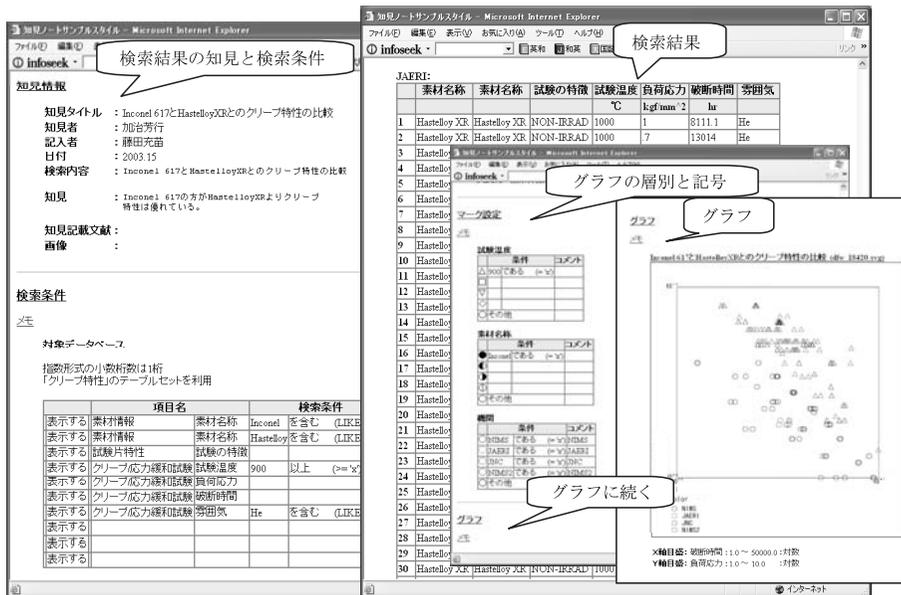


図4 知見ノートの例

述することによって、DFW のデータ検索が単なる表やグラフを表示するだけでなく、知識をも表示する機能を備えたことになる。

3.4 知見ノートのデータ加工

知見ノートは XML で記述されているので、表やグラフの表示形式を利用者が自由に変換、そして利用者がすでに使用しているアプリケーションのデータフォーマットに容易に変換ができる。しかも、検索した数値に付随する単位なども容易に受け継ぐことができる。さらに、表形式で表示されている数値データを、図 3 の (d) 画面を用いて加工した結果をグラフに表し、新たな知見ノートとして登録できる機能を備えている。このような知見ノートが、経験豊かな多数の材料の専門家によって作成され、集積されれば、材料分野の知識ベースとなりうる。この知識ベースは、XML で記述されているので多くの研究者に利用されることにより、新たな観点からの知見の生成を可能にすることが期待できる。

4 考察

4.1 知見ノートの XML 記述

材料情報の XML 記述によって、情報の共有を円滑にすることを目的にした MatML^[8]あるいはデータ構造の異なるデータベースのデータ連携を考慮した XML が考えられている^[9-11]。したがって、XML のタグの項目名やその階層が多くの人によって受け入れられることが前提になっている。そのため、XML の有効な活用にまで至っていないのが現状である。ここでは、XML による記述を DTD やスキーマを考えないで、まず、DFW からのデータ検索や検索結果の再現の共有と検索結果から得られた知見の共有をめざして、知見ノートの XML 記述を試みた。したがって、材料情報を XML で記述するための DTD やスキーマをことさらに定義しなくても、DFW の

データ構造は NIMS, JAERI, JNC の 3 機関とも同一であり、そのデータ項目や単位が活用でき、それに検索条件を加味することによってデータ検索の再現が可能になる。また、データ検索結果は表形式で表示されているのでこれを XML で記述したが、検索データの加工では XML を意識することなく表の数値を用いて列や行に関して簡単な数値演算をおこなっている。検索結果から得られる知見には、知見タイトル、記入者、日付、検索内容、知見、知見記載文献などの項目などの 7 個のタグで構成されているにすぎない。データ検索から得られたことのメモである。また、知見ノートで記述されることは、DFW で意味のあるデータ検索を行った際の忘備録でもあるといえよう。

4.2 知見ノートのデータ加工による新たな知見例

データ検索結果が表やグラフで表示されても、ある性質が 2 つ以上の因子で影響される場合、その特性が同じ条件で測定された結果であれば、2 種類の材料でどちらの材料がその特性が優れているかを比較することが出来るが、測定条件が異なると直接比較することは難しい。この場合、その特性に影響する 2 つの因子の影響機構に基づいて 2 つの因子を別の 1 つの因子に統合して、材料間の比較が行われることがある。それには、知見ノート上のファクトデータをグラフで表示することもできる。そのため、知見ノートを編集や加工によって新たな知見ノートから検索して記載されているデータの加工を行い新たな知見として追加できる機能が必要になる。この知見ノート作成システムでは、この機能を備えている。その例として、高温で使用される材料の特性を評価するためのクリープ特性を取り上げて示す。材料に高温で長い時間荷重が負荷されると、しだいに材料が伸びて破断に至る。この破断に至る時間をクリープ破断時間と称し、高温で材料が使用に耐えるか否かを

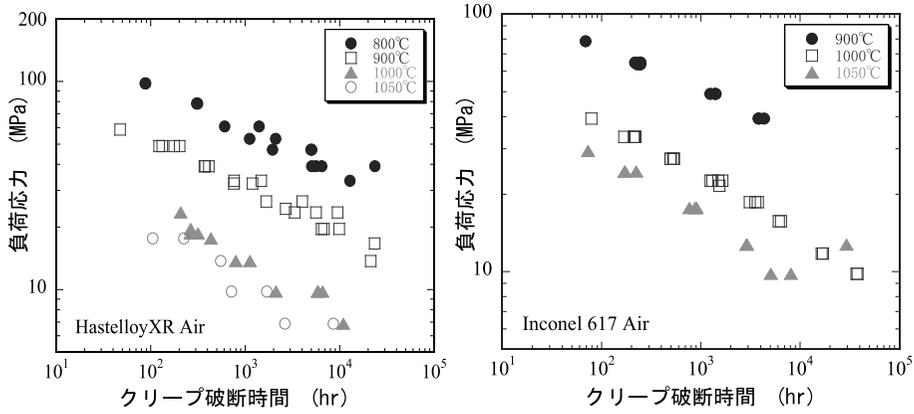


図 6 HastelloyXR と Inconel617 のクリープ破断曲線の比較

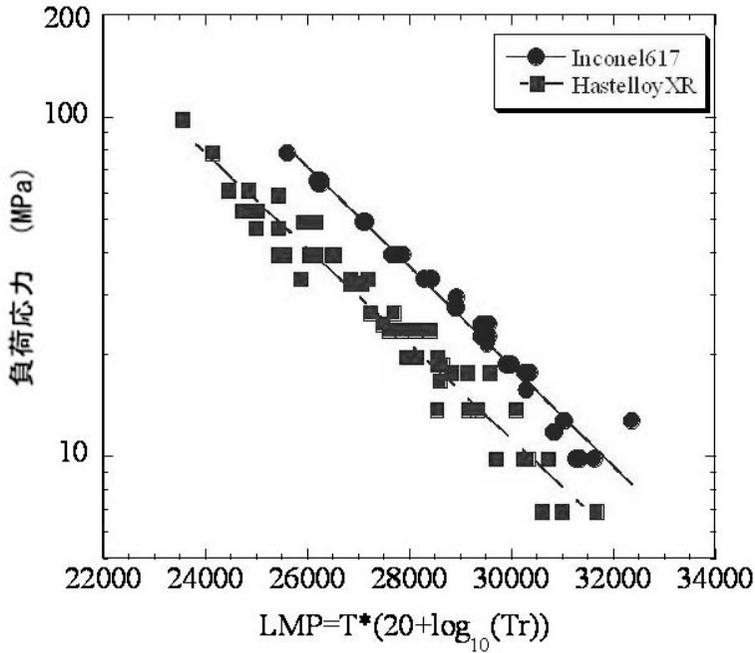


図 7 HastelloyXR と Inconel617 のクリープ強度の比較

示す1つの特性である。この破断時間は、温度と負荷応力、(単位面積当たりの負荷荷重)の2つの因子に影響される。負荷応力が一定なら、高温ほど破断時間が短くなり、温度が一定なら負荷応力が高い程破断時間は短くなる。一般には、クリープ破断曲線として、図6

のようなX軸を破断時間とY軸を負荷応力の対数グラフで示される。クリープ破断時間が負荷応力と試験温度の2つの因子に影響されるが、クリープ破断機構を考慮した種々統合するための考え方が示されてきた。

ここでは、Larson-Miller のパラメータ

(LMP) と負荷応力との関係を、2種類の、HastelloyXR と Inconel617 の材料で比較した例を示す。

(LMP) は、次のような式で示される。

$$\text{LMP} = T \times (C + \log T_r)$$

C は、定数で、材料によって 15-30 の変動する数値である。ここでは、両合金とも 20 を使用した。 T_r はクリープ破断時間 (hr) である。

HastelloyXR と Inconel617 とともに 800°C 以上の高温で使用される材料である。両合金とも熱交換器に使用される合金である。すでに登録されている HastelloyXR と Inconel617 の知見ノートのデータを加工して、空気中でのクリープ強度はどちらの合金が高いかを、調べることにする。クリープ破断時間の試験温度は、Hastelloy XR は 800-1050°C であり、Inconel617 は 900-1050°C である。試験温度域さらに負荷応力も異なるので、データ加工を行うと同じ温度域で使用した場合のクリープ破断特性を比較することが可能である。LMP と負荷応力の関係を示す図 7 のグラフをみれば、Inconel617 は、同じ負荷応力でも高い LMP を示しているので、HastelloyXR より破断し難いことが分る。

このように、材料特性が 2 つ以上の因子に影響される場合データ加工を行って、その結果をグラフで表示すると、どちらの材料がある特性にたいして優れているかを容易に理解できる。このデータ加工の過程を知見ノートとして格納しておけば、使用条件に最適な材料を選択する上での支援に役立つであろう。しかも、XML で知見ノートは記述されているので、このような知見が多数蓄積できれば、より多くの人々によって共有され、新たな知見の生成を支援することが可能になるであろう。

5 おわりに

これまで NIMS, JAERI, JNC 及び JST の 4 機関が分散型材料データベース, (DFW) システムの開発を共同して進めてきた。この DFW を材料探査・設計や材料現象の解明及び新材

料創製のためのより効率的な支援システムとすること、利用対象者を材料研究者から理工学技術者まで幅広い層に拡大することを目的として、ファクトデータベースから抽出した原子力用材料知識をそれぞれの機関の知識ベースに格納し、インターネットを介して相互利用可能な分散型知識ベースシステムを共同で開発した。一般的なファクトデータベースの検索では、格納されたデータが表やグラフとして検索結果が表示されるにすぎない。この知識ベースシステムは、検索結果を専門家が知見ノートとして集積し、ファクトデータベースを検索する前に知見ノートを参照することによって、データ検索を容易にかつ詳細な検索を可能にした。XML で記述した知見ノートは、将来、知識ベースの 1 つの知識を構成し、しかも世界規模での共有が可能となると考えられる。

今後は、各機関が知識ベースに格納する知見ノートの量を充実させ、さらに元となるファクトデータベースのデータの整備・充実を進めていく予定である。

本研究は文部科学省原子力試験研究委託費によって行われたものである。

参考文献

- [1] Tsuji, Hirokazu; Yokoyama, Norio; Fujita, Mitsutane; Kano, Shigeki; Tachi, Yosiaki; Shimura, Kazuki; Nakajima, Ritsuko; and Iwata, Shuuich: "Distributed Database System for Mutual Usage of Material Information (Data-Free-Way)", Materials for Advanced Power Engineering 1998, Part III, pp.1739-1745, Liege, (Belgium), (1998).
- [2] Tsuji, Hirokazu; Yokoyama, Norio; Fujita, Mitsutane; Kano, Shigeki; Tachi, Yosiaki; Shimura, Kazuki; Nakajima, Ritsuko; and Iwata, Shuuich: "Distributed Database System for

- Advanced Nuclear Mutual Materials, (Data-Free-Way)”, Proc. 9th Inter. Conf. On Modern Materials & Technologies, pp.417–424, Florence, (Italy), (1999).
- [3] Tsuji, Hirokazu; Yokoyama, Norio; Fujita, Mitsutane; Kano, Shigeki; Tachi, Yosiaki; Shimura, Kazuki; Nakajima, Ritsuko; and Iwata, Shuuich: “Present Status of Data-Free-Way, (Distributed Database System for Advanced Nuclear Materials)”, Journal of Nuclear Materials, 271&272, pp.486–490, (1999).
- [4] Fujita, Mitsutane; Kinugawa, Jhunich; Tsuji, Hirokazu; Kaji, Yoshiyuki; Tachi, Yoshiaki; Saito, Junich; Shimura, Kazuki; Nakajima, Ritsuko and S. Iwata: “Application of the Distributed Database, (Data-Free-Way) on the Analysis of Mechanical Properties in Neutron Irradiated 316 Stainless Steel”, Fusion Engineering and Design, 51–52, pp.769–774, (2000).
- [5] 藤田充苗; 栗原豊; 館義昭; 加納茂機; 新藤雅美; 横山憲夫; 志村和樹; 岩田修一: 「データフリーウェイ — 分散型材料特性データベース —」, 第32回情報科学技術研究集会発表論文集, p.87–92, (1995).
- [6] 館義昭; 加納茂機; 藤田充苗; 辻宏和; 横山憲夫; 志村和樹; 岩田修一: 「データフリーウェイにおける画像データ利用」, 第35回情報科学技術研究集会予稿集, p.97–100, (1998).
- [7] 加治芳行; 吉田健司; 益子真一; 藤田充苗; 志村和樹; 衣川純一; 辻宏和; 宮川俊一; 岩田修一: 「データフリーウェイからの知識の生成 ファクトデータベースから獲得される知見の表現方法」, 第38回情報科学技術研究集会予稿集, pp.43–47, (2001).
- [8] <http://www.matml.org/downloads/matml.xsd> (2003年4月2日参照)
- [9] 芳須 弘; 井島 清; 原田幸明; 首藤俊夫; 土屋正治; 大谷津 裕: 「材料データベースのオープンシステムの構築」, 第37回高温シンポジウム前刷集, 日本材料学会, (1999), pp.165–169.
- [10] 首藤俊夫; 土屋正治; 大谷津 裕; 芳須 弘; 井島 清; 原田幸明: 「材料データベースのオープンシステムの構築」, 第37回高温シンポジウム前刷集, 日本材料学会, (1999), pp.170–174.
- [11] 芳須 弘; 原田 幸明; 山崎 政義; 藤田 充苗: 「材料情報のXMLによる記述とその応用」, 第39回情報科学技術研究集会予稿集, 科学技術振興事業団, (2002), A62.

(2003年5月7日受付)

(2003年7月10日採択)