材料分野の数値データ解析用数式を XML 形式化する際の問題点

The problems for XML formalization of the formulas for numeric data analysis of the materials field

芳須 弘^{1*}, 原田幸明¹, 藤田充苗¹, 芦野俊宏²

Hiroshi YOSHIZU, Kohmei HALADA, Mitsutane FUJITA, Toshihiro ASHINO

*1 物質・材料研究機構

National Institute for Materials Science

〒305-0047 茨城県つくば市千現 1-2-1

E-mail: YOSHIZU.Hiroshi@nims.go.jp

2 東洋大学

Transdisciplinary research Integration Center, Toyo University

〒112-8606 東京都文京区白山 5-28-20

E-mail: ashino@acm.org

セマンティック Web 技術を用いて, 材料問題解決支援システム構築の問題点抽出を進めている。本報告は, 材料の力学問題解決に必要な材料特性データやデータ解析に用いる解析モデル式などの収集を行い, データ解析で数式を取扱う場合の XML 記述の問題点について検討した。その結果, 数式を XML 形式である MathML により記述する場合, 材料分野において数式で使用する文字や記号の統一と数式の理解を共通化することで円滑なデータ解析作業が可能である。そこで, 統一した文字や記号を提案し, その活用例を示した。

We tried to construct the solution supported system for problems in materials field using semantic Web technologies and pointed out necessary functions. In this report, mechanical properties data and model formulas for analysis of data were collected in order to resolute mechanics problems. And then the application of the MathML, that was XML description in the formula to the system was examined. Consequently, in order to solute smoothly data analysis and the problem in materials field was enabled by communalizing unification of the character and symbol which are used with the formulas that were expressed by MathML. Thus, the unification were proposed and an example of the application was introduced.

キーワード: セマンティック Web, 材料問題解決支援システム, XML, 数式, 機械的特性, Semantic Web, Solution Supported System for Problems of Materials Field, XML, Formula, Mechanical Properties

1 はじめに

発展しつつあるセマンティック Web 技術により材料問題解決のための支援システム構築の問題点を検討してきた[1]。システムが取り扱う材料情報の記述形式として XML が不可欠であり、材料特性などの数値データや必要な情報の提供サイトの記述形式を共有する必要性を示した。材料分野の情報記述の共有化については、MatML[2]があり、VAMAS 標準化活動で NMC-MatDB[3]として、また最近では NEDO のプロジェクトを通して世界共通の書式 Materials Ontology[4]として提案されている。

バーナーズ・リーの階層図の提案にしたがって、XML (データ記述)、RDF (データの所在場所)、そして OWL (語彙の関係、材料オントロジ) を用いてシステム上での情報の連携を考え、問題解決への手順例を検討してきた[5]。本報告では、材料強度の比較などの問題解決に必要な数値データを XML 形式で記述し、それらのデータ解析に必要な数式の取扱いについて調べた。数式についても XML 形式で記述されていることが必要であり、W3C から MathML[6]が勧告、公表されている。そこで、必要な数式を MathML 形式により記述した。

2 材料問題解決支援システムの設計概念

2.1 システムに必要な機能

材料問題を解決するための必要な情報、材料データベース (以下、データベースを DB と略)、材料特性データ、そしてデ

ータ解析のための数式などの材料情報を連携して問題解決の支援をするものである。前述したようにすでに材料 DB 記述の枠組み (NMC-MatDB) や材料特性データの XML 化については実現している[7]。Web 上には、専門書誌、規格、特許、報告書、特性数値 DB、そして材料カタログなど多くの情報があり、日々更新されている。支援システム構築にあたって、これらの情報の中から必要とする情報を容易に検索できる機能が必要である。そのため、検索を容易にするための各種の辞書を整備し、それらを検索の際にキーワードとして用いることによって、的確な情報を容易に見出せることを示した[1]。さらに、支援システムに必要な機能として、材料 DB や実験から得られる数値データの解析を行う機能が必要である。

2.2 数値データ解析

材料分野では、種々の条件で実験を行うか、材料 DB から材料特性などの数値データを得て、実験条件と特性の関係を種々のモデルに基づいた数式を用いてデータ解析を行う。その結果を基に材料現象の明確化や構造物の設計指針が策定されている。その解析概念を図 1 に示す。数値データ解析には、XML で記述された実験条件と特性からなる数値データを材料分野の数式 DB から目的に応じた数式を検索して、その数式を用いてデータ解析し、その結果を表やグラフとして表示する機能が必要である。数式 DB の数式は MathML 形式にしたがって記述するとより容易に数式の共有が可能である。

次節ではこの数式情報について MathML 形式による数式記述を述べる。

図1 材料問題解決支援システムにおける数値データ解析の概念図

3 MathML による数式記述

データ解析に必要な数式の XML 記述は MathML があり，この形式にしたがうことにする．しかし，材料分野で使われる数式は，材料の専門領域によって数式の文字や記号の意味が異なることがある．そのためには，材料分野でも専門領域に限定して使用されている文字や記号の意味の統一がまず必要になる．そこで，材料の強度を対象とする構造材料の機械的特性に関する数式を MathML で記述する際の問題点について以下で検討する．

3.1 数式の文字・記号

はじめに，材料の強度を対象とした場合の数式を記述する文字や記号について調べた．その記号や式を図2に示す．材料に引張荷重を加えた場合を想定してみると，材料は引張荷重（F）の増加とと

$$\sigma(S_y, S_T) = \frac{F}{A_0} \quad \sigma_T(S_T) = \frac{F_{\max}}{A_0}$$

$$= \frac{L_f - L_0}{L_0} \quad = \frac{F_0 - F}{F_0}$$

$F_{\max}$: 最大引張荷重

A_0 : 試験片の原断面積

S_y : 降伏強度 (0.2% 耐力)

$\sigma_T(S_T)$: 引張強さ

: 破断伸び

L_0 : 試験前の標点距離

L_f : 試験後の標点距離

F_0 : 試験前の断面積

F : 試験後の断面積

図2 材料の強度に関する数式，記号

もに弾性変形から塑性変形をへて最後に破断に至る．それぞれの段階で強さが測定され，データベースに収録されている．

材料の強度は弾性変形から塑性変形に移行しはじめる強度を降伏強度（0.2%耐力）と呼び S_y あるいは σ_y で示される。また、最大引張荷重を示したところを引張強さ S_T あるいは σ_T と呼ぶ。強度は材料の単位面積当たりで表され、 S_T あるいは σ_T は、負荷荷重（F）/面積（A）で算出されMPaの単位が用いられる。また、材料を引張ると変形して伸びるが、その伸びは ϵ で表され、材料の強靱性やねばさの指標として破断時の最終変形量として絞り ϵ_f が1つの指標になる。これらは、 $\epsilon_f = (L_f - L_0)/L_0 \times 100$ 、 $\epsilon = (F - F_0)/F_0 \times 100$ で表され、%の百分率で表される。

引張強さに S_T あるいは σ_T が使用されているように数式に用いれる記号が同じでも意味することが異なる場合があるので、添え字を含めた文字や記号の意味することの統一と共有が必要である。

3.2 クリープ特性解析用数式の記述

一定温度で一定の負荷荷重が加わる環境下では、材料は時間の経過とともに変形して破断に至る。この現象をクリープと呼び、高温で使用する材料ではこのクリープ特性が機器設計に重要となる。クリープ強度に関する数式は、前節の引張強さの数式に温度の影響因子が加わったものとなる。クリープ特性は、材料に様々な温度で様々な荷重を負荷した数10組の試験を行って、そのデータをもとにして負荷荷重と温度の関数によりはじめてクリープ破断に耐える時間が与えられる。その基本関数もクリープ破断の実験値を評価する専門的な数式がいくつかあり、その数式を図3に示す。データ解

クリープ破断データ解析モデル

Larson-Millerパラメータ法

$$P_{LM} = (T + 273.15)(\log t_R + C)$$

Orr-Sherby-Dornパラメータ法

$$P_{OSD} = \log t_R - \frac{Q}{19.1425(T + 273.15)}$$

Manson-Succopパラメータ法

$$P_{MS} = \log t_R + B(T + 273.15)$$

Manson-Haferdパラメータ法

$$P_{MH} = \frac{\log t_R - \log t_g}{(T + 273.15) - T_g}$$

応力の多項式回帰

$$P = b_0 + b_1 S + b_2 S^2 + \dots + b_k S^k + e_i$$

$$T_R = \text{Temperature (deg C)} + 273.15$$

$$Y = \log(t_R)$$

$$t_R = \text{Time to rupture (h)}$$

$$S = \log(\sigma)$$

$$\sigma = \text{Stress (MPa)}$$

$$b_0, b_1, b_2, \dots, b_k = \text{Regression Coefficient}$$

$$k = \text{Degree of Regression}$$

$$e_i = \text{Error Term}$$

図3 クリープ特性に関する数式

析では、これらの数式を用いて所定の材料のクリープ特性を最も正確に表す数式が選択され、その材料のクリープ特性が把握される。この解析には、材料DBや実験により得られた数値データが使用されるが、前述したこれらの材料情報はXMLによる記述が進められているが、これらのXML記述には、数式記述を考慮してタグとなる要素に単位などとともに文字や記号の属性をも指定すべきである。

3.3 MathMLの記述方法

MathMLでは表示と内容の記述形式が

MathML では表示と内容の記述形式がある．例えば，表示 MathML では関数名や変数名などの識別子を表す<mi>，演算子や区切り記号を表す<mo>，そして数値を表す<mn>などのタグにより数式が図 2 に示した数式のように表される．内容 MathML は Mathematica[8]などの解析用ソフトウェアで解析するための形式で表現される．例えば，演算子は<plus>，数値は<cn>で表され、数式の内容（処理）を理解できる形式である．図 4 に示した MathML 記述例はクリーブ破断データを解析する Larson-Miller パラメータ式の例である．左に表示，右に内容 MathML で記述した．また，前述した図 3 は表示 MathML で記述した数式を Web ページに

組み込んで表示した例である．後述する数値データ解析では内容 MathML で記述した数式を Mathematica で利用した例を述べる．

4 数式の利用例解析

Mathematica による数式利用例を図 5 に示す．図 5 では数式に使用される変数の説明，上段の四角囲い部分は Mathematica での MathML 形式の数式をインポートする命令文，中段の四角囲いはインポートした数式の表示、そして下段の四角囲いは計算結果である。この手順により，Web 上の数式と解析ソフトウェアの連携（Mathematica 利用に際しては

<pre> <math xmlns='http://www.w3.org/1998/Math/MathML'> <mrow> <msub> <mi>P</mi> <mi>LM</mi> </msub> <mo>=</mo> <mrow> <mrow> <mo>(</mo> <mrow> <mi>T</mi> <mo>+</mo> <mn>273.15</mn> </mrow> <mo>)</mo> </mrow> <mo>⁢</mo> <mrow> <mo>(</mo> <mrow> <mrow> <mi>log</mi> <mo>⁢</mo> <msub> <mi>t</mi> <mi>R</mi> </msub> </mrow> <mo>+</mo> <mi>C</mi> </mrow> <mo>)</mo> </mrow> </mrow> </math> </pre>	<pre> <math xmlns='http://www.w3.org/1998/Math/MathML'> <apply> <times/> <apply> <plus/> <ci>T</ci> <cn type='real'>273.15</cn> </apply> <apply> <plus/> <ci>PC</ci> </apply> <ln/> <ci>tR</ci> </apply> </math> </pre>
表示MathML	内容MathML
<div style="border: 1px solid black; padding: 10px; text-align: center;"> <p>数式例</p> <p>(Larson-Millerパラメータ式)</p> $P_{LM} = \frac{(T+273.15)(\log t_R + C)}{}$ <p>下線部分を記述</p> </div>	

図 4 数式の MathML 記述

図5 Mathematica による数式利用例

中間ファイルが必要であり、ソフトウェアに依存する) が可能となる。また、目的の計算の省力が可能になり、計算結果に材料分野特有のタグが付けられるので内容の理解がコンピュータにも可能である。

5 おわりに

MathML で記述された材料分野の数式が Web 上に提供されていると、目的の数式を選択して Mathematica などのソフト

ウェアに取り込むと目的の数値データ解析がより用意になる。

ここで、問題点として、

1) 数式に用いられる記号が同じでも意味することが異なる場合があるので、添え字を含めた文字や記号の意味することの統一と共有が必要である。

2) 材料分野の ML には、数式記述を考慮して、タグとなる要素に文字や記号の属性をも指定すべきである。

参考文献

- [1] 芳須 弘他：高度材料情報の的確な獲得方法の検討, 情報知識学会誌, Vol.15, No.3, pp.19-30, 2005
- [2] MatML: National Institute of Standards and Technology, in U.S.A., <http://www.matml.org/>
- [3] 材料データベース委員会, 材料データベースに関する情報収集及び調査研究報告書, 大阪科学技術センター附属ニューマテリアルセンター, 2006
- [4] Materials Ontology: <http://www.codata.org/>
- [5] 材料問題解決支援システム: http://www.nims.go.jp/vamas_twa10/test-hp/
- [6] MathML: <http://www.w3.org/Math/MathML>
- [7] インターネット版先進材料特性ファクトデータベース: http://www.nims.go.jp/vamas_twa10/
- [8] Mathematica: Mathematica ver.6.0, Wolfram Research, 2006