

生物多様性を規範とした材料技術開発支援に向けた バイオミメティック・オントロジーの試作

A Trial Development of Biomimetics Ontology for Materials Engineering Based on Biological Diversity

古崎 晃司*¹
Kouji Kozaki

來村 徳信*¹
Yoshinobu Kitamura

溝口 理一郎*²
Riichiro Mizoguchi

*¹ 大阪大学産業科学研究所

The Institute of Scientific and Industrial Research (ISIR), Osaka University

*² 北陸先端科学技術大学院大学

Japan Advanced Institute of Science and Technology

For biomimetics research, it is important to develop biomimetics database which enable us to find a huge variety of knowledge across different domains. To realize such database, an interoperability of knowledge between them is necessary. Ontologies clarify concepts that appear in the target domains and contribute to improvement of interoperability. This article discusses a trial development of biomimetics ontology for materials engineering based on biological diversity.

1. はじめに

科学技術の発展において、「自然に学ぶ」ことはかねてより重要とされていたが、近年になって欧米を中心にバイオミメティクス(biomimetics)と呼ばれる「自然に学ぶものづくり」に関する研究開発が注目されている。例えば、ロータス効果と呼ばれる蓮葉の撥水性を模倣した塗装やセルフクリーニングに関する研究、ヤモリの指の粘着性に着目した接着剤の開発、流体抵抗の低いサメ肌の構造を模した高速水着の開発など、生物が持つ特徴のメカニズムを解明し、それを模倣することで優れた機能を有した新材料が開発されている。

国内においても、「生物多様性」すなわち「高炭素世界の完全リサイクル型技術」に学んで新しい技術規範(パラダイム)を体系化した「生物規範工学」を創生することを目指した研究が進められている。「生物規範工学」では、生物学と工学の双方の研究者が協力し、「生物の技術体系」を明らかにすることで、生物多様性と生物プロセスに学ぶ材料・デバイスの戦略的設計・製造を達成し、新たな「科学・技術体系」として「持続可能性社会」の実現に貢献することを目指している。

このような異分野融合を目指した次世代科学の実現には、多種多様なデータや知見の分野を超えたスムーズな連携が不可欠である。特に、生物規範工学が目指しているバイオミメティック研究には、生物資源の標本情報(インベントリ)、生物の分類学的知識、生物資源を観測した電子顕微鏡画像など、社会的・工学的な観点からのニーズ、といった多種多様なデータや知見を、生物学と工学の両分野の研究者が領域横断的に利用可能なバイオミメティック・データベースの整備が重要とされる[下村 10]。

その実現には、種々の異分野データと知識の相互運用性の確保が必須であることに加え、対象となる各分野の知識の適切な体系化が重要となる。このような背景のもと本研究では、オントロジー工学に基づき、生物多様性を規範とした材料技術開発支援するバイオミメティック・データベースを開発することを目的としている。本論文では、その中核となるバイオミメティック・オントロジーの開発と利用方法についての基礎的な考察を行う。

以下、2章ではバイオミメティック・データベースに求められる要件と基本設計について議論し、3章では、バイオミメティック・オントロジーの試作について述べる。続く4章では今後の課題について述べ、5章で本論文を総括する。

2. バイオミメティック・データベース

2.1 バイオミメティック・データベースに求められる要件

バイオミメティック・データベースの開発は、科学研究費補助金・新技術領域研究(研究領域提案型)の研究課題「生物多様性を規範とする革新的材料技術」¹の一部として進められている(研究期間:H24~28年度)。本領域研究の目的は、生物多様性に学んで新しい技術規範(パラダイム)を体系化した「生物規範工学」を創生することにある。バイオミメティック・データベースは、自然史学、生物学、農学、材料科学、機械工学、情報学、環境政策学、社会学といった人類の自然認識体系として本来一体のものであるべき諸学問を再架橋するオープン・イノベーションのプラットフォームと位置づけられている。

具体的には、博物館が所蔵する生物資源インベントリを基盤とし、情報科学の技術を駆使することで、新たな技術を開発しようとする工学研究者が、生物多様性と適応に関する情報を通じた技術革新の着想を得ることのできる、発想支援型データベースシステムを構築することを目指している。

このようなバイオミメティック・データベースに求められる要件は以下の3つが挙げられる。

(1) 多種多様なデータや知識の相互運用性

生物学と工学という異分野連携、多数の異なる機関から提供されるデータの統合、標本や文献情報をはじめとするテキスト形式、電子顕微鏡画像、実験データ、など異なるデータ形式の統合といった、様々な内容/形式のデータの相互運用性を確保しつつ統合する。

(2) 発想支援・連想型の検索機構

新規技術の開発の着想を得ることを目的とした検索においては、あらかじめ検索したい内容を固定するのではなく、機能、構造、プロセス、生態系など多様な観点から試行錯誤を繰り返しながら、利用者の発想を刺激する仕組みが重要となる。また、

連絡先: 古崎晃司, 大阪大学産業科学研究所 知識システム
ム研究分野, 〒567-0047 大阪府茨木市美穂ヶ丘8-1,
Tel:06-6879-8416, kozaki@ei.sanken.osaka-u.ac.jp

¹ <http://biomimetics.es.hokudai.ac.jp/>

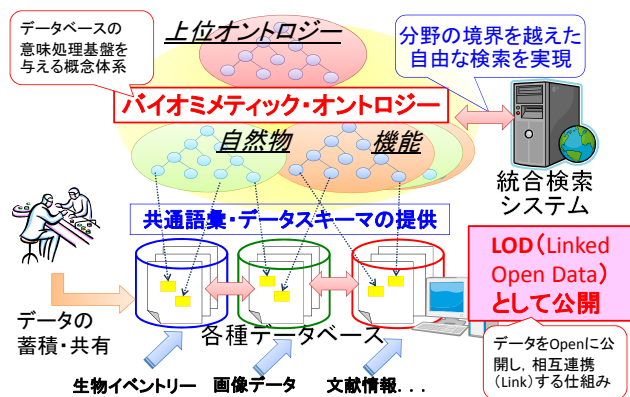


図1 バイオメティック・データベースの全体像

新たなアイデアの着想につながる“想定外の(思いがけない)”の結果が発見できる仕組みも必要とされる。

(3) オープンなプラットフォームとしての公開

生物学と工学にとどまらず、様々な領域の知識をつなぐことで新たなイノベーションの促進が期待されるため、誰もが自由に利用できる仕組みを作ることで、プラットフォームを自己成長させることが重要となる。

これらの要件を満たすデータベース開発の為に、本研究では、要件(1)および(2)に対してバイオメティクス・オントロジーを構築・利用し、要件(3)に対して、Semantic Web 技術を用いて Web 上のデータを相互に連携(Linking)させることにより新しい価値を生み出そうとする Linked Data¹の技術を利用する。

2.2 バイオメティック・データベースの基本設計

図1に本研究で開発するバイオメティック・データベースの全体像を示す。

バイオメティック・オントロジーは、データベースの意味処理基盤を与える概念体系として、本データベースの中心的な役割を担う。バイオメティック・オントロジー構築の際には、生物学と工学という全く異なる研究領域の共通性を見出し適切に概念化する必要があるため、もの、プロセス、構造、など、あらゆる対象世界に共通する一般的な概念を定義した上位オントロジー²[溝口 12]に準拠しつつ、自然物、生物種、機能(生態機能、材料機能など)、構造、など各分野に固有の概念構造を抽象化して、上位オントロジーの概念構造に写像する。これにより、分野の違いを超えた概念レベルでの知識の相互運用性を確保する。さらに、バイオメティック・オントロジーに基づき、生物種毎のイベントリーをはじめとした各種データベースで用いる共通語彙および共通の概念構造(スキーマ)を提供する。これらをメタデータとして各データベースに付与することで、異なる機関から提供される、内容・形式ともに多様なデータの統合を実現する。

バイオメティック・データベースに用いる発想支援・連想型の検索機構としては、サステナビリティサイエンス分野における利用実績のある「利用者の視点に応じたオントロジー探索技術」[Kozaki 11]、および、概念定義の意味構造に基づいた柔軟な検索を実現する「多段階展開型検索手法」[古崎 13]を用いる。オントロジー探索技術は、オントロジー内の概念レベルにおける意味的つながりを利用者の観点に応じて探索する技術であり、観点に制限を加えない発散的な探索と、特定の観点から収束的に探索する手法を組み合わせることで、利用者の発想に知

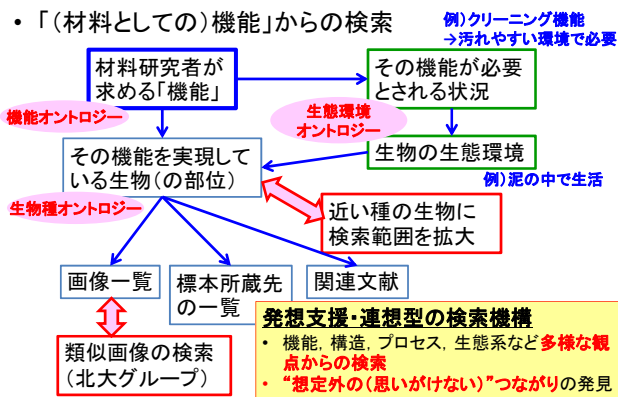


図2 バイオメティック・データベースに求められる検索事例とそれを実現するのに必要なオントロジー

的な刺激を与える。一方、多段階展開型検索手法は、オントロジーで定義された概念構造を適切に利用することで、検索結果として得られる範囲を柔軟に管理することが出来る手法であり、オントロジーやデータベースが大規模になったとしても、膨大な情報に埋もれることなく、利用者が必要とする情報を取得することを支援できると期待される。

そして、構築したデータベースは Linked Data の形で公開することで、Linked Data として公開されている他の生物情報などと連携が容易となり、外部データベースを有効活用すると共に、公開したデータベースのよりオープンな利用の促進につながる期待される。

このように、バイオメティック・オントロジーを介することで、各データベース間の連携を可能とし、分野の相違を意識することなく、境界を越えた自由な統合検索システムを開発することができる。これにより、生物学と工学という全く異なる研究領域の有機的な連携を促進し、バイオメティック研究を支えるオープンイノベーションプラットフォームの実現への貢献が期待される。

3. バイオメティック・オントロジーの試作

3.1 バイオメティクス研究者に求められる検索事例

前章で述べた考察に基づき、バイオメティック・オントロジーの試作を行った。オントロジーの構築に先立ち、バイオメティクス研究に従事している複数の工学系の研究者に、「どのような検索がしたいか」という質問をしたところ、「開発したい(材料の)機能から、その機能を実現している生物(の部位)を探したい」という声が多く聞かれた。実際に、蓮の葉の「超撥水」やヤモリの指の「粘性」など、バイオメティック研究の成功事例として語られる開発事例の多くは、生物の機能を模倣したものであることから、工学の観点からは「機能からの検索」がバイオメティック・データベースに必須であることは当然と思われる。

また、生物学者と工学者が共同で研究を進めていく上で、「生物学者には当然であっても、工学者は知らないこと」がしばしば見られる、という声も聞かれた。例えば、“ある生物の電子顕微鏡画像を観察していると、非常に特徴的な突起を持った構造が観察され、「どのような機能があるのだろうか？」と工学者が疑問に思っていた。一方、生物学者がその画像を見ると、それがある昆虫の前脚の画像で、その昆虫は滑りやすい面にしがみつくといい生態を持っているので、その突起が「滑り止め」の機能を持つのでは…と推察できる」といった具合である。このような事例から、バイオメティック・データベースには、分野間の知識のギャップを埋める役割が求められると分かる。

¹ <http://linkeddata.org/>

² http://www.ei.sanken.osaka-u.ac.jp/hozo/onto_library/upperOnto.htm, YAMATO: Yet Another More Advanced Top-level Ontology

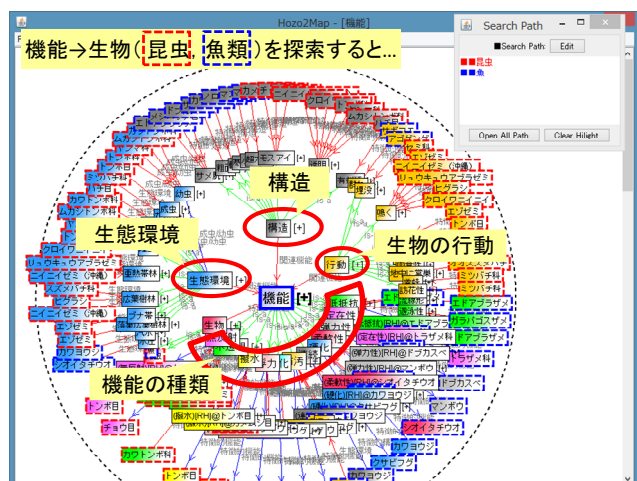


図3 機能から生物へのつながりの探索例

以上のような考察から、バイオメティック・データベースにおけるオントロジーを用いた検索として、“材料研究者が求める「機能」から、その機能を実現している「生物(の部位)」を検索する”ことを第一の目標として、それに必要なオントロジーの構築を試みることにした。その際に、単に、工学的な材料と生物の機能を直接的に結びつけるだけでは無く、生物学の知識が必要とされる別の観点からの検索も可能とするようなオントロジーの構成を検討した。

3.2 オントロジーの構築方針

図2に試作したバイオメティックス・オントロジーの構成と、それぞれのオントロジーがどのような検索に用いられるかを示す。

材料研究者が求める機能を表すには、機能オントロジーが必要となる。オントロジー工学的な意味で厳密な機能の定義には、先行研究で開発した機能オントロジー[Kitamura 10]を用いることができるが、直感的な検索をサポートするためには、材料研究者が普段使用している語彙を、表層語彙レベルの機能オントロジーとして用意することが好ましい。それには、ナノテクノロジーオントロジーの一部として開発された、インデックスレベルのオントロジー[垂見 10]を利用しつつ、必要な語彙を追加するという手法が考えられる。機能オントロジーで定義された機能に関する語彙を、生物種オントロジーで定義した生物種やその部位と結び付けることで、“ある機能を実現している「生物(の部位)」の検索”が可能となる。

一方、生物学の知識を表すものとして生態環境オントロジーを構築する。生物の生態環境は、その生物が有する生態機能と密接に結びついている。例えば、泥の中を主な生活環境とする魚には、泥が付いても汚れないという「クリーニング機能」を有しているものがある。上述の機能オントロジーと生態環境オントロジーを結び付け、さらに、生態環境オントロジーを生物種オントロジーと結び付けることで、“ある機能が必要とする生態環境”を介して、「その環境で生活する生物種」を検索する”といった、同じ機能に関しても別の観点からの検索が可能となる。同様にして、生物の行動、構造など、機能を中心として関連するオントロジーの整備を進めることで、より多くの観点からの検索が実現できる。

さらに生物種のオントロジーを用いると、必要に応じて検索対象を近い種の生物に広げるなど、検索範囲をオントロジーの概念構造を用いて管理することが出来る。特にオントロジーの is-a 階層を用いた検索範囲の制御は、よく用いられる手法であるが、

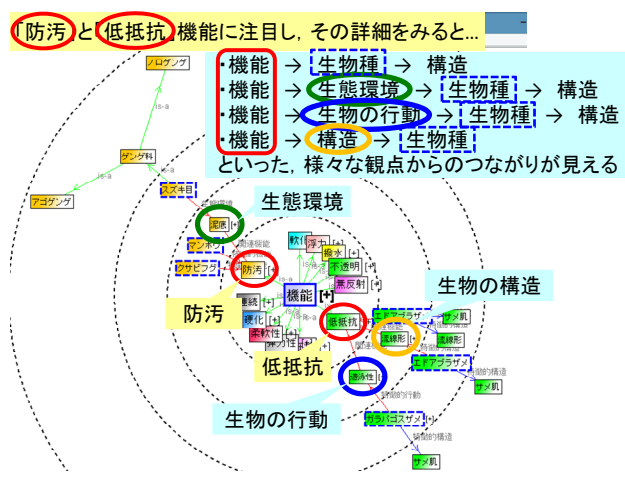


図4 「防汚」と「低抵抗」機能に注目した探索結果の詳細

本研究では、is-a 階層の概念的意味をより適切に利用した「多段階展開型検索手法」[古崎 13]を用いる予定である。

3.3 オントロジーの試作

前節で述べた方針に沿って、小規模なオントロジーを試作した。対象とした生物種は、博物館に所属する昆虫および魚類の研究者から生物種の情報が提供された、バイオメティック・データベース開発用に電子顕微鏡写真を撮影した昆虫 13 種、魚類 12 種である。それぞれの生物種について、種・科・目の情報を用いて生物の is-a 階層¹を構築した。さらに、それぞれの生物種毎に、特徴的な機能、構造、行動、生態環境を定義した。

このオントロジーを対象として、「機能」から「生物」への関係性のつながりを「オントロジー探索ツール」[Kozaki 11]を用いて探索した結果を図3に示す。この図から、様々な種類の「機能」が定義されていることに加えて、「機能」が「生態環境」、「構造」、「生物の行動」に結び付けられていることが分かる。

ここで、「防汚」と「低抵抗」という2つの機能に着目して、その詳細を見ると、図4に示すように、

- ・機能 → 生物種 → 構造
- ・機能 → 生態環境 → 生物種 → 構造
- ・機能 → 生物の行動 → 生物種 → 構造
- ・機能 → 構造 → 生物種

といった、機能を中心とした様々な観点からの概念のつながりが見える。バイオメティック・データベースでは、これらの概念のつながりを利用して、それぞれの概念と対応づくメタデータが付与されたデータを検索することで、オントロジーに基づく検索機構を実現する。

4. 今後の課題

バイオメティック・オントロジーの構築および、バイオメティック・データベースの開発は、現在、研究の初期段階にあり、今後の課題が多く残っている。以下、その一部について述べる。

(1) 検索用ユーザインタフェースの設計・開発

3.3 節で示したオントロジー探索結果の表示方法は、オントロジー探索ツールを用いたものであり、検索用のユーザインタフェースとして適しているとは限らない。「多段階展開型検索手法」との併用も含め、データベース検索用のユーザインタフェースの設計・開発が必要とされる。

¹ 本来、生物種はインスタンスであるが、ここでは生物の種、科、目を概念として捉え is-a 階層を構築した。生物種のオントロジー的扱いについては、今後、再考する余地がある。

(2)機能概念オントロジーの活用

本研究で試作した機能オントロジーは、簡単な表層語彙レベルの is-a 階層を構築したものに留まっている。今後、生物の機能をより適切に概念化して捉えるためには、機能概念オントロジー[Kitamura 10]の本格的な活用が必要とされる。特に、方式概念を用いた機能分解の枠組みを用いることで、領域やグレインサイズが異なる機能を、統一的な枠組みで捉えることが可能となる。さらに、同一の機能であっても、複数の方式で実現できることを明示的に表すことができ、材料設計支援システム[垂見 08]と同様の枠組み、データベースの利用の発想を支援することができる。

(3)メタデータの設計

構築したオントロジーをデータベースと連携させるためには、データベースに付与するメタデータの設計が必要となる。Linked Data としての公開を予定しているため、メタデータの記述形式には RDF を用いるが、メタデータスキーマについては、簡易的なキーワード付与に用いる簡単なものと、機能概念オントロジーに基づき機能語彙と方式概念を用いて機能構造を捉えるために設計されたスキーマ Fanotation[Kitamura 06]の併用を検討している。

(4)オントロジー検索とインスタンス検索の適切な組み合わせ

技術的な課題の 1 つとしては、通常のデータベースにおけるインスタンスデータの検索と、オントロジーの検索を適切な組み合わせにより、新たな検索手法の確立がある。大規模な Linked Data の検索においては、構築や検索にかかるコストとの兼ね合いから、インスタンスの検索を中心に行われる傾向もあるが、ユーザの発想を刺激するような探索的検索を実現するには、オントロジーにおいて定義された意味構造を適切に活用することが重要になると考えられる。本研究では、オントロジー探索と多段階展開型検索手法の組み合わせた概念レベルの検索を、インスタンスレベルの検索へ拡張することで、それを実現しようと考えている。

(5)オントロジーの拡充

幅広い生物種の多様性を適切に扱うためには、バイオメテック・オントロジーの拡充が必須となる。機能オントロジーについては、従来研究の成果から考えて数百から数千の語彙でカバーできると思われるが、生物種の数については主要なものでも数万、詳細なものを含めると数百万に至る。このような生物多様性をデータベースに取り込むには、既存の Linked Data やソースとして公開されている生物種の情報の活用が必要となる。

ただし、標本情報や画像情報など、生物学の研究者から提供されるデータには限りがある為、提供されたデータに関係した生物種を中心としたオントロジーの拡充も並行して行う必要がある。

5. おわりに

本論文では、バイオメテック研究を支えるオープンイノベーションプラットフォームとして開発を進めているバイオメテック・データベースの実現に向けた、バイオメテック・オントロジーの構築について述べた。このオントロジーに基づき、共通語彙やメタ概念構造を提供することにより、各データベース間の連携を可能とし、分野の相違を意識することなく、境界を越えた自由な統合検索システムを開発することができる。これにより、生物学と工学という全く異なる研究領域の有機的な連携を促進し、バイオメテック研究を支えるオープンイノベーションプラットフォームの実現に貢献することが期待される。また、バイオメテック・オントロジーの構築とそれを用いたデータベースの開発は、異分野を融合した知の構造化の実践事例として、学術的・社会的な両面から意義深い貢献を果たすことが期待される。

謝辞

本研究の一部は科学研究費補助金 新学術領域研究(研究領域提案型)24120002「バイオメテックス・データベース構築」および、基盤研究(B)25280081「オントロジーの多次元視点管理に基づく領域横断型セマンティックデータの知的探索」の助成による。

参考文献

- [下村 10] 下村政嗣:生物の多様性に学ぶ新世代 バイオメテック材料技術の新潮流, 科学技術動向 Vol.110, pp.9-28, 2010.
- [溝口 12] 溝口理一郎:オントロジー工学の理論と実践, 274p., オーム社, 2012.
- [Kozaki 11] K. Kozaki, T. Hirota, and R. Mizoguchi : Understanding an Ontology through Divergent Exploration, In Proc. of 8th Extended Semantic Web Conference (ESWC2011), pp.305-320, Heraklion, Greece, May 29 - June 2, 2011.
- [古崎 13] 北河祐作, 古崎晃司:大規模オントロジーの知的探索に向けた多段階展開型概念検索システムの開発, 人工知能学会研究会資料, SIG-SWO-A1203-09, 2013.
- [Kitamura 10] Y. Kitamura and R. Mizoguchi: Characterizing Functions based on Ontological Models from an Engineering Point of View, In Proc.of FOIS2010, 301-314, 2010.
- [垂見 10] 垂見晋也, 古崎晃司, 來村徳信, 溝口理一郎: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, 人工知能学会論文誌, Vol.25, No.5, pp.579-592, 2010.
- [Kitamura 06] Y. Kitamura et.al: Towards Ontologies of Functionality and Semantic Annotation for Technical Knowledge Management, LNCS, 4012, 17-28, 2006.
- [垂見 08] 垂見晋也, 古崎晃司, 來村徳信, 田中秀和, 溝口理一郎:機能発揮・製造プロセス知識統合的記述枠組みに基づくナノテク材料設計支援システムの開発, 人工知能学会論文誌, Vol. 23, No. 1, pp.36-49, 2008.