

PoLyInfo Ontology (Ver. 0.1)

国立研究開発法人物質・材料研究機構

石井真史 坂本浩一

序文

ここでは PoLyInfo Ontology

pli: <<http://dice.nims.go.jp/ontology/PoLyInfo-ont/Schema#>>

の考え方を概説する。Owl ファイルを

<https://dice.nims.go.jp/ontology/about.html>

にて公開しているので、これを Protégé などのオントロジーエディタ

<https://protege.stanford.edu/>

で参照しながら本解説文を読まれることをお勧めする。

PoLyInfo Ontology の概要

PoLyInfo Ontology の特徴の一つとして、外部のオントロジーの中でその位置づけを明確にして、概念の連携を行っていることである。すなわち PoLyInfo のいくつかの概念系列の最上位のクラスは、外部のオントロジーのサブクラスとなる。以下にその概念系列、最上位のクラス、関係を持つ外部のオントロジーの一覧を示す。

表 1 PoLyInfo Ontology の基礎概念と外部オントロジーの関係

概念系列	PoLyInfo 最上位概念	下位概念(例)	上位概念(外部オントロジー)
データ系列	pli:PoLyInfoData	ポリマー分類の定義	obo:IAO_0000030 (information content entity)
材料系列	pli:PoLyInfoMaterial	ホモポリマーの定義	
構造系列	pli:PoLyInfoStructure	ポリマーの繰り返し単位の定義	
名前系列	pli:Name	IUPAC 構造基礎名等のポリマーの名称	obo:IAO_0000300 (textual entity)
サンプル系列	pli:PolyinfoSample	PoLyInfo に収録されているサンプルの実体	bfo:BFO_0000040 (material entity)
物性系列	pli:PolyinfoProperty	PoLyInfo に収録されているサンプルの物性	bfo: BFO_0000020 (specifically dependent continuant)

ここで使用している prefix は次のとおりである。

表 2 PoLyInfo Ontology と繋がっている外部オントロジーと prefix

Prefix	名前空間	外部オントロジー
Bfo	http://purl.obolibrary.org/obo/	Basic Formal Ontology
Obo	http://purl.obolibrary.org/obo/	Information Artifact Ontology
Pli	http://dice.nims.go.jp/ontology/PoLyInfo-ont/Schema#	PoLyInfo Ontology

この定義の特徴として、材料系列が Information Artifact Ontology の information content entity の下位概念、すなわち、「情報」として扱われている点である。例えば“Homopolymer”という語は、時折具体的な実在する物質の名称のように使われるが、このオントロジーでは情報として扱う。この位置づけは、同じ上位概念を持つデータ系列についても同様である。データ系列で扱われるポリマー分類において、例えば“Polyimide”という語はークラスであり、実在する物質ではなく、情報として扱われる。一方で、PolyInfo で扱われるサンプルの実体は、サンプル系列として Basic Formal Ontology の material entity の下位概念として定義される。

ポリマープロセスの概念

PoLyInfo データベース

<https://polymer.nims.go.jp/>

の特徴の一つは、ポリマーの一次構造から高次構造まで系統的に扱っていることである。このオントロジーでは、一次構造と高次構造に関するプロセスは、本質的に位置づけが異なる。それぞれのプロセスの概念は、以下のように外部のオントロジーのサブクラスとして定義される。

表 3 PoLyInfo Ontology の重合と加工概念と外部オントロジーの関係

概念系列	PoLyInfo 最上位概念	下位概念(例)	上位概念(外部オントロジー)
重合プロセス系列	pli:SamplePolymerization	開環重合、付加重合など	obo:BFO_0000015 (process)
材料プロセス系列	pli:MaterialProcessing	成形など高次構造のプロセス	obo:OBI_0000011 (planned process)

重合プロセスは、仕様で定めるといよりも単なる現象の“process”と位置づけている。この概念は、表 2 にもある Basic Formal Ontology の中で定義してある。一方で、高次構造の作成に関する材料プロセス系列は、“planned process”、すなわち「仕様で定められたプランを実現するプロセス」と位置づけられる。この planned process の概念は Ontology for Biomedical Investigations のなかで定義されている。PoLyInfo で扱うポリマーの planned process は MaterialProcessing の下位として定義され、以下の 4 つの概念をサブクラスに持つ：

- ・ Uniformization 均一化プロセス
- ・ BlendCompatibilizationKneading ポリマーブレンドの相溶化と混練プロセス
- ・ Molding 成形プロセス

- ・ MoldingTreating 成形処理プロセス

ポリマー物性の概念

表 1 において、ポリマーの物性は pli:PolyinfoProperty で定義された。PoLyInfo で扱われている 100 余りの物性は、この下位概念で定義されるが、公開されているデータベースの物性分類に従って、18 のクラスが設けられている(owl ファイルでは、ThermalProperty を代表例として示している)。更にその下位で分類された物性が定義される。例えば、ガラス転移温度は、この ThermalProperty の下位に位置づけられる。

まとめ

本 Readme ファイルでは、PoLyInfo の概観を述べた。煩雑さを避けるために、ごく一部となったが、それでも外部のデータベースとの連携の実証に成功している。連携は

<https://integbio.jp/rdf/>

及び、独立行政法人 製品評価技術基盤機構のデータベースでも実装される予定である。

付録

PoLyInfo Ontology のメインの部分ではないが、ここでは PoLyInfo Ontology で定義してある重要な概念をまとめておく。

概念記述子

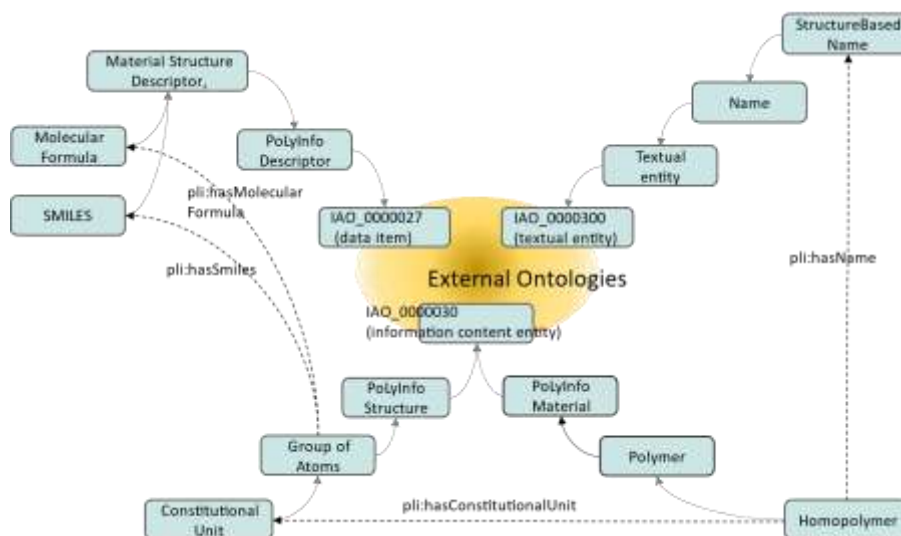
ポリマーのいくつかの概念を特徴づける記述子を定義した。この記述子の概念は、外部の Information Artifact Ontology で定められた、data item の下位に位置付けられる。記述子の例は、幾何記述子における材料記述子における SMILES や分子式などが挙げられる。

付録表 1 PoLyInfo Ontology の細部概念と外部オントロジーの関係

概念系列	PoLyInfo 最上位概念	下位概念(例)	上位概念(外部オントロジー)
記述子系列	pli: PolyinfoDescriptor	幾何記述子、材料記述子、時間記述子	obo:IAO_0000027 (data item)

述語

PoLyInfo Ontology で定義されたクラスは、様々な述語で関係づけられている。以下に簡単な例を示す。PoLyInfo Ontology の述語が異なる外部オントロジーを繋いでいることが分かる。



付録図 1 PoLyInfo Ontology で定義された述語の例