

物性間の関係性データベース作成 (上) : マテリアルキュレーション®のために

Construction of Database on Relations among Physical Properties (1)

物材機構¹ ○吉武 道子¹

NIMS¹, °Michiko Yoshitake¹

E-mail: yoshitake.michiko@nims.go.jp

「マテリアルキュレーション®」とは、科学原理も含めた材料情報を分野横断的に活用して材料探索を行う、著者が提唱している手法である(図1参照。特徴は知識データベースを利用する点[1])。今まで、応用物理学会の講演会においてもその概念や具体例をいくつか発表してきた。また、その探索のツールとなる物性間関係図探索システムのプロトタイプ開発も行ってきた[2]。物性間関係図とは、さまざまな材料の性質がその性質の発現原理に基づく関係性を有し、それをネットワーク構造に表現したものである。

今までは、発表者が場合に応じて文献調査を行い、物性間の関係性を手動で見つけてきた。しかし、システムとして広く利用できるようにするには、物性間の関係性データベースが必要で、その作成ための何らかのコンピュータ支援技術が必要である。そこで、まず、既に関係性が有るとわかっている性質を表現する術語同士の間、自然言語処理的に関係性を見つけることが出来るかどうかを調査したので報告する。

[1]吉武道子: 日本金属学会誌, 80, 603(2016).

[2]吉武道子, 桑島功, 柳生進二郎, 知京 豊裕: 表面と真空, 61, 200(2018)

俯瞰的材料探索

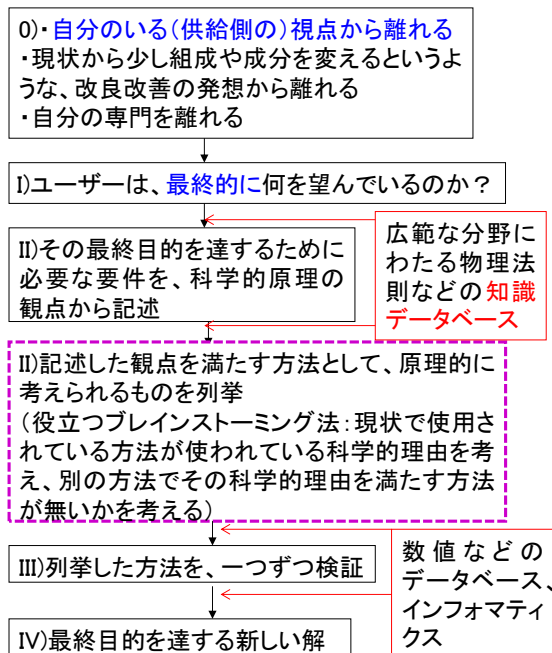


図1 マテリアルキュレーション®過程の模式図

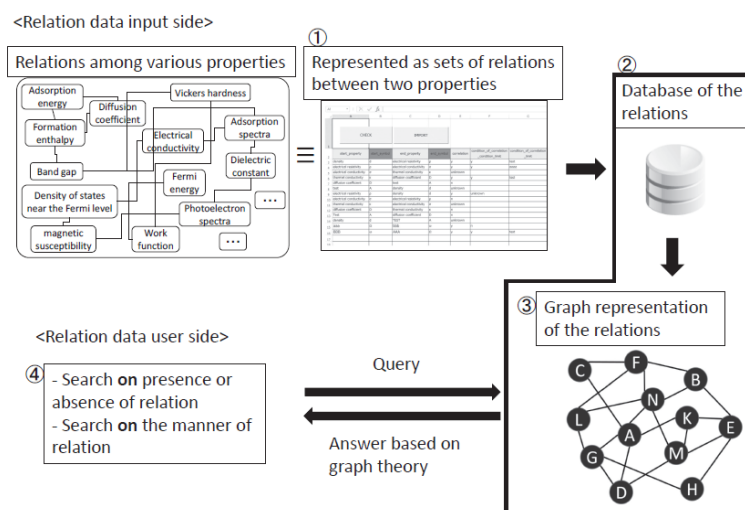


図2 物性間関係図探索システムの概念図