

# 材料計測データのハイスループットな収集と計測インフォマティクス

## High-throughput Data Collection for Materials and Measurement Informatics

物材機構 ○松波成行, 原田善之, 鈴木峰晴, 篠塚寛志, 長尾浩子, 松田朝彦, 吉川英樹

NIMS-DPFC, ○S. Matsunami, Y. Harada, M. Suzuki, H. Shinotsuka, H. Nagao, A. Matsuda,

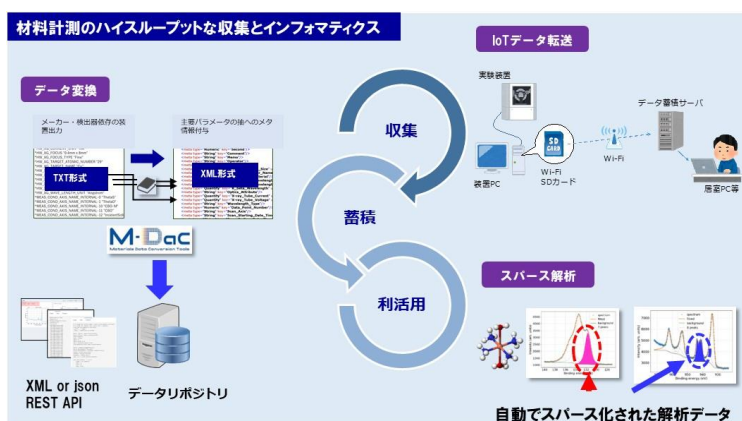
H. Yoshikawa

E-mail: MATSUNAMI.Shigeyuki@nims.go.jp

**緒言:** 物質・材料研究機構 (NIMS) 統合型材料開発・情報基盤部門 材料データプラットフォームセンター (DPFC) では、一般公開を目指した材料研究データバンクとその活用プラットフォームの構築と、機械学習などデータ駆動型研究による材料探索の効率化をはかること目的としたデータ収集、データ蓄積、およびデータ利活用についての基盤整備を進めている。

**概要:** これまで当機構は、計測・プロセスデータの**データ収集**として IoT クラウド基盤技術を活用したデータ転送システムについて発表してきた[1]。本システムは、計測装置やプロセス装置のパソコン(装置 PC) に通信セキュリティを施した Wi-Fi SD カードを装着することで、ネットワーク接続していない PC からでも生データをワイヤレス通信で自動的にまた安全にデータサーバへ転送ことができ、計測装置やプロセス整備から送られてくる大量のデータを効率よく集積することを可能にしている。**データ蓄積**においては、機械可読性を高める計測データのメタ情報の抽出、語彙変換ならびに高付加価値を一体化して処理することができるツール (M-DaC) の開発を行い、系統的な計測データの蓄積を行っている[2]。これにより、計測装置やメーカーで異なるデータ形式であったとしてもメタ情報を抽出することで膨大な数の計測データ群からの特定データファイルの検索を容易にし、また、メタ情報による紐づけでデータ互換性が可能となり、データ統合を可能とする。**データ利活用**については、現在、X 線光電子分光 (XPS) 計測について、ベイス情報量基準 (BIC) に基づくスペクトルのピーク分離やスペクトル解析を主体とした研究と開発を進めている[3]。

本講演では、これらのデータ駆動型研究に資する材料計測データの収集から蓄積を経て利活用(解析)に至るまでをハイスループットに行う取り組みについて事例も交えて紹介する。



【参考文献】 [1] 松田、他、第 79 回秋季応物学会、18a-231A-8, [2] NIMS プレスリリース (2019.1.30)

<https://www.nims.go.jp/news/press/2019/01/201901290.html>, [3] H. Shinotsuka, et al., submitted.