マテリアルキュレーション®用関係性データベース作成：後処理

Database Construction on Relations among Physical Properties: Post-processing

物材機構[1]　○吉武 道子[1]

NIMS[1], ○Michiko Yoshitake[1]

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、その特徴は知識データベースを利用する点である[1]。最大の特徴は、データが少ない・ほとんど無い場合でも、科学法則を利用して材料探索すべき方向性を見つけることが可能な点である。目的とする物性に関係が有ると予想して入力したパラメータ（物性に関わるデータ）から成る空間を越えた空間を探索可能である（下図）。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。

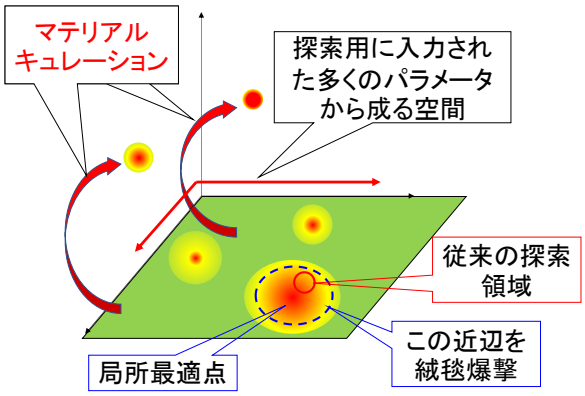


図　マテリアルキュレーション®による材料探索の概念図。機械学習とは異なり、数値データを必要としないため、(数値) データがほとんど無くても探索指針を得ることが出来る。

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対を学習させて、深層学習による自然言語処理技術を用いて文書から関係性を抽出することを試み、前回の応用物理学会で報告した[3]。前回の発表では、関係性そのものはある程度抽出できるものの、抽出したい単語対ではないが文法上は関係性の記述と違いがない対が大量に抽出される（いわば、ゴミが大量に含まれている）という問題があった。今回、この深層学習による自然言語処理技術を用いて抽出された関係性データに後処理を施すことにより、「ゴミ除去」を試みた。

[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)
[3]吉武道子: 2018 年第 79 回応用物理学会秋季学術講演会 19a-212B-1

© 2019年 応用物理学会