マテリアルキュレーション®支援システムの将来構想

Future of Materials Curation® Support System

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、著者が提唱している、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手法で、その特徴は知識データベースを利用する点にある[1]。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である。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、その探索のツールとなる物性間関係図探索システムのデモ開発も行ってきた[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。実際に使える関係性ネットワークを形成するには、コンピュータによる関係性の自動抽出技術が欠かせないため、企業との共同研究によってコンピュータによる関係性の自動抽出技術を内包した物性間関係図探索システム（＝マテリアルキュレーション®支援システム）のプロトタイプ開発を行った[3, 4]。

現在、関係性の自動抽出技術の基礎となる自然言語処理技術（コンピュータに文章を理解させる技術）自体が発展途上であるが、その進歩は目覚ましい。そこで、自然言語処理技術が進展した暁にマテリアルキュレーション®支援システムがどのような形になると考えているかについて、出願済みの特許ポートフォリオ、関係性データや探索システムのモジュール化、教育・研修用への応用など、全体像の構想について報告する。

[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).
[3]吉武 道子，佐藤 文孝，矢野 貴之，河野 洋行，萩原 稔，応物春季講演大会 10a-S321-2
[4]吉武 道子，佐藤 文孝，矢野 貴之，河野 洋行， 金属学会誌投稿中.

© 2020年 応用物理学会