

マテリアルクレーション®支援システムの概要

Introduction to Materials Curation® Support System

物材機構¹, Ridgelinez² °吉武 道子¹, 河野 洋行²

NIMS¹, Ridgelinez², °Michiko Yoshitake¹, Hiroyuki Kawano²

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

著者らは、専門が細分化しがちな材料研究開発において、分野横断的に既に知られている知識を活用するツールとして、様々な物性間に（科学原理に立脚して）存在する関係性をデータベース化して探索ができるシステムの開発を行ってきた[1,2]。これは、材料科学関係の教科書（固体物理学や材料力学、高分子化学など）から、屈折率や電気伝導度・ガラス転移温度などの物性が、別の物性とどのように関係しているかについての記述をコンピュータを用いた自然言語処理により抽出して、関係性をネットワーク型データベースとして構築し、望みの関係性を探索できるシステムである。

プロトタイプ開発を行い、材料の研究開発を行っている企業や JST 未来創造プロジェクトのメンバーなどでトライアル使用していただいている。また、NIMS WEEK のポスター展示では来場者が動作できる環境を準備した。本システムはサーバー上で動作するため一般に操作してみる機会は限定的なので、今回、具体的な画面遷移などを含め紹介する。図に示したのは、システムの2つの基本的な使い方を示したものである。上は、入力した2つの物性間がどのような物性を通じて関係しているかを示すもので、一例として以下のような場合に用いる。物性 A を向上させようと組成を変えたら、思いもかけず物性 B が悪くなってしまったという場合に、どうして物性 A が物性 B に影響を与えるのかがわかる。下は、入力した物性 C と繋がっている物性、その物性からまた繋がっている物性と、次々と繋がりを辿っていくもので、物性 C をターゲットとして機械学習を行う際に記述子として入力すべき物性の参考や、機械学習により得られた特徴量（物性）がどうして物性 C に効いているのかを調べる際に用いることができる。

今回、口頭発表形式に変更があり、発表者の PC を用いたプレゼンを行うことになったので、会場のネット接続環境次第ではあるが、サーバーに接続してデモをお見せする予定である。

- [1] 吉武道子, 桑島功, 柳生進二郎, 知京豊裕, 表面と真空 61, 200-205, 2018. 及び NIMS 特許
- [2] 吉武道子, 佐藤文孝, 河野洋行, J. Surf. Anal., 27, 22-33, 2020.

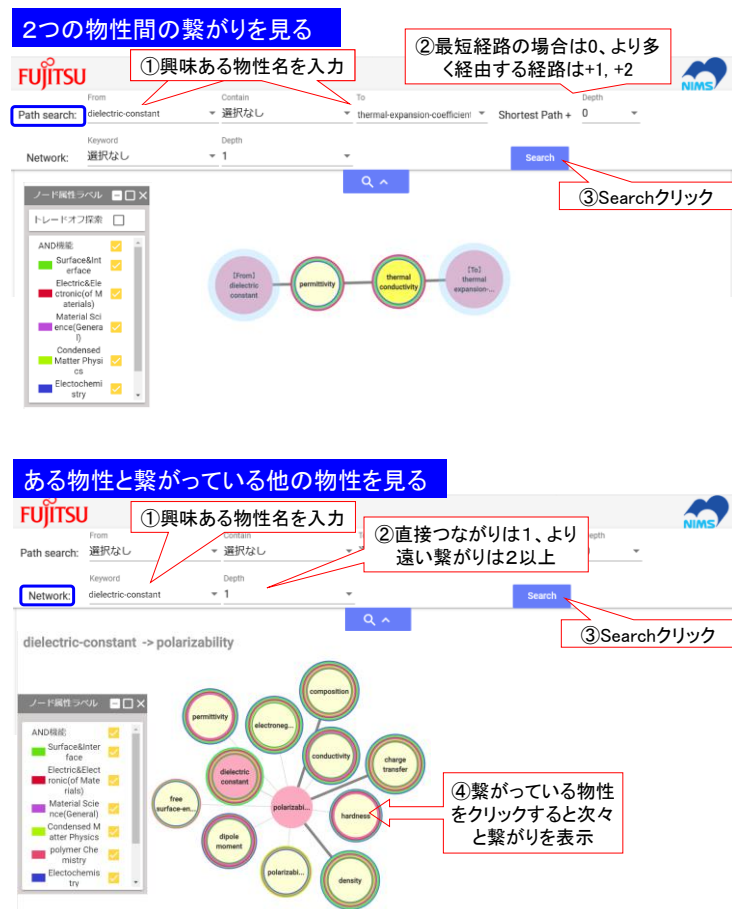


Fig. 1 Two typical ways of using Materials Curation® Support System.