

マテリアルキュレーション® (MatQ™) 用物性間関係性探索システムにおける探索優先順位付け

Prioritization of Search in Materials Property Relation System for Materials Curation®

物材機構¹ ○吉武 道子¹

NIMS¹, °Michiko Yoshitake¹

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

科学原理に基づいて、材料の物性間に存在する関係性を関係性のデータベースとし、関係性を探索することで、ある物性が思いもかけない物性の影響を受けている、ある物性を制御するのに思いもかけない物性を変化させればよい、などの情報が得られるシステムを提唱している[1]。企業との共同研究により、プロトタイプ開発を行って[2]実際にデモ体験の機会を提供した。実用化の際の問題の一つは、関係が多すぎてどの関係性を辿ったらよいかわからないことである（図参照）。ただ、どの関係性を辿ったらよいかはユーザーに依存するので、ユーザーが何を優先して辿りたいかを選択することで、その選択に応じた優先度を表示する方法が考えられる[3]。本報告では、その優先順位付けに関して報告する。

分野横断的に科学原理を活用して思いもかけない物性の影響を見る、という趣旨からは、分野を横断して辿る探索方法が優先される可能性が高い。そのため、関係性を抽出した文書の分野をエッジの属性としてデータベースに記憶してエッジの色の違いとして表示する、ノードが抽出された文書の分野もノード属性としてデータベースに記憶してノードの色の違いとして表示する、などの分野情報の記憶・表示が考えられる。表示を見てユーザーが探索経路を判断してもよいし、異なる分野をまたぐ回数で優先順位を付けて経路を表示させてもよい。また、関係性を記述した文書中から、「物性 A が増加すると物性 B が増加する」というような記述を抽出して、正の相関（A が増加なら B も増加）と負の相関（A が増加すると B が減少）の区別をエッジの属性としてデータベースに記憶し、探索時に相関の正負による優先順位付けが選択された場合には、選択に応じて物性量の増減で優先順位付けすることが考えられる。その他にも様々な優先順位付けが考えられる。

[1] 吉武道子、桑島功、柳生進二郎、知京豊裕、表面と真空, 61, 200 (2018).

[2] 吉武道子、佐藤文孝、河野洋行、J. Surf. Anal., 27, 22 (2020).

[3] 特願 2019-502838(出願日 2018-02-07)



Fig: Screen capture of the system on properties having a relation with tensile strength.