

(5) ポスター発表

次世代材料データプラットフォームの概要

P54

Materials Data Platform and its future vision

谷藤幹子 tanifuji.mikiko@nims.go.jp

物質・材料研究機構 MaDIS 材料データプラットフォームセンター

1. 背景・目的

マテリアル・インフォマティクスの進展に伴って、性能予測や物質探索などに向けたデータ駆動型のプラットフォームやアプリケーションの需要が高まっている。特に研究創成の段階(データをつくる)から利用(データをつかう)を実行するデータプラットフォーム構築の取り組みが産学官で進んでおり、その中でもインフォマティクスに使うことを念頭に、質を一定に担保した材料データを集める NIMS の取り組みは日本初である。データ利活用にはデータについての情報(メタデータ)が必要であり、異なる手法や目的でつくられたデータを同一に扱うにはデータ間の互換性も必要になる。またデータの作者、計測装置、分析に使用するソフトウェアなど、データにかかる記述要素は多様で、多次元である。これらを記述するメタデータや語彙(用語)を、最大公約数的に標準メタデータスキーマとしてモデル化し、データプラットフォームとして運用することを目的としている。

2. データプラットフォーム機能

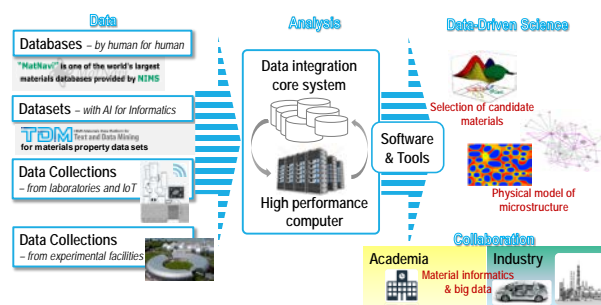
データプラットフォームは、①つくる機能としてのメタデータの生成機能、②ためる機能としてのリポジトリ機能、③つかう機能としての検索(発見)と取得、④グローバル ID を付与して引用可能とする機能の4つに大別される。これらは研究プロジェクト等の研究条件に依存して生成、管理されているので、プロジェクト毎に合わせたデータの来歴、所在、実験レシピなどをメタデータとして取り出し、RDF 記述に対応する標準スキーマに沿って整形し、Linked Open Data (LOD)化することが、データプラットフォームの技術的な挑戦課題である。LOD 化された多種多様なデータとメタデータを束ねて一元管理し、検索可能とする。また、データの GUI/API 取得について、適切なユーザー管理およびデータについてのオープン・クローズ方針に基づいた適切な利用許諾も、セキュアなプラットフォーム機能として重要な機能である。

3. 結果と考察

日本での材料科学の研究開発を発展・加速するためのプラットフォームは、AI 時代における解析や予測などインフォマティクスを加速するデータ解析機能と共に、次世代リポジトリというデータ駆動型集積・活用という役割を担っている。自分だけがわかる自分の実験・計算データを、自分以外にも分かるデータ説明と形式でリポジトリに登録し、適

切な利用規約の下に利用可能とするデータ蓄積文化の醸成が重要となる。その醸成には、メタデータの作成や変換を支援するツール、蓄積したデータを可視化して気づきに繋げる SPARQL 検索が有効であり、機械学習など目的別に「つかう」シーンに応える次世代リポジトリの課題として取り組んでおり、知識構造化への展開を次課題としている。

Materials Data Bank Project 2017 - 2021 Materials Data Platform for integration knowledge and informatics



材料データバンク構想による次世代データプラットフォーム。

【共著者】

吉川英樹(物質・材料研究機構 MaDIS 材料データプラットフォームセンター 材料データ解析グループ)

【参考文献】

- [1] M. Tanifuji, A. Matsuda and H. Yoshikawa: Materials Data Platform - a FAIR System for Data-Driven Materials Science, Proc. The 8th Int. Congress on Advanced Applied Informatics (IIAI-AAI), 2019, 1021-1022.
- [2] M. Ishii, T. Takemura and M. Tanifuji: PoLyInfo RDF: A Semantically Reinforced Polymer Database for Materials Informatics, Proc. ISWC 2019 Posters & Demonstrations, Industry, and Outrageous Ideas Tracks co-located with 18th International Semantic Web Conference (ISWC 2019).
- [3] 谷藤幹子、吉川英樹、データ相互利用を可能とするデータプラットフォーム技術、応用物理学会、2019年3月11日。

【関連WEB】

- [1] 材料データプラットフォームセンター
<https://www.nims.go.jp/research/materials-data-pf/>
- [2] NIMS Materials Data Conversion Tools (M-DaC),
https://github.com/nims-dpfc/M-DaC_XPS