

## 材料科学分野でのデータ利活用 「データプラットフォーム」という取り組み

NIMS情報統合型材料開発部門 (MaDIS)  
材料データプラットフォームセンター (DPFC) センター長 谷藤 幹子

2019年1月10日 (木) 日本学術会議第12回情報学シンポジウム「データドリブンエコノミーの実践」

1

機能から物質を探索

JSTイノベーションハブ構築事業  
情報統合型物質・材料開発  
イニシアティブ



2015.7~

材料の実用化を加速

内閣府SIP「革新的構造材料」  
マテリアルズインテグレーション



2014.10~

統合型  
材料開発  
システムの  
実現

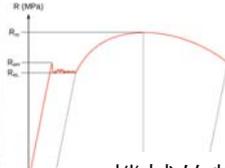
データを作り、貯め、活用する

**Materials Research Bank (MRB)**  
物質・材料データプラットフォームの構築

2017.4~

展伸材	非熱処理型合金	純アルミニウム (1000系)	熱処理型合金の 合金元素組合せ	
		Al-Mn 系合金 (3000系)		
	Al-Si 系合金 (4000系)			
	Al-Mg 系合金 (5000系)			
熱処理型合金		Al-Cu-Mg 系合金 (2000系)	Cu, Cu + Mg,	
		Al-Mg-Si 系合金 (6000系)		
		Al-Zn-Mg 系合金 (7000系)		
鋳物・ダイカスト	非熱処理型合金	Al-Si 系合金 (AC3A, ADC1)	Mg + Si, Si + Mg, Zn, Zn + Mg	
		Al-Mg 系合金 (AC7A, ADC5, ADC6)		
	熱処理型合金			Al-Cu-Mg 系合金 (AC1B)
				Al-Cu-Ni-Mg 系合金 (AC5A)
				Al-Cu-Si 系合金 (AC2A, AC2B)
				Al-Si-Mg 系合金 (AC4A, AC4C, AC4CH, ADC3)
				Al-Si-Cu 系合金 (AC4B, ADC10, ADC12)
				Al-Si-Cu-Mg 系合金 (AC4D, ADC14)
				Al-Si-Cu-Ni-Mg 系合金 (AC8A, AC8B, AC8C, AC9A, AC9B)

アルミニウム合金のJISコード体系



機械的特性(引張試験)



機械的特性(シャルピー衝撃試験)



顕微鏡では1000倍〜10000倍、また顕微鏡や写真を併せた顕微鏡撮影の解像度は3000〜12000ピクセルの範囲で行なう。もちろん、温度の高いほど変位計の精度は低下するが、顕微鏡が拡大しやすく、高速度の撮りこみで連続的に撮影を続けることもできる。顕微鏡の視野は、視野(FOV)は、視野径(FOV径)が顕微鏡の視野径を拡大して得られた画像を示す。顕微鏡の視野径は、このように顕微鏡を撮影するための視野径を拡大して得られるが、実際の視野径は顕微鏡の視野径を拡大して得られた画像を拡大して得る。顕微鏡を撮影するための、顕微鏡や写真を併せた顕微鏡撮影の解像度は3000〜12000ピクセルの範囲で行なう。

マイクロ組織写真(光学顕微鏡観察)



プロセッシング  
(叩いて伸ばす)



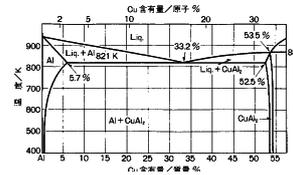
プロセッシング  
(油に漬けて冷やす)



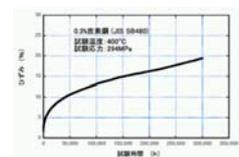
プロセッシング  
(温めて引き伸ばす)



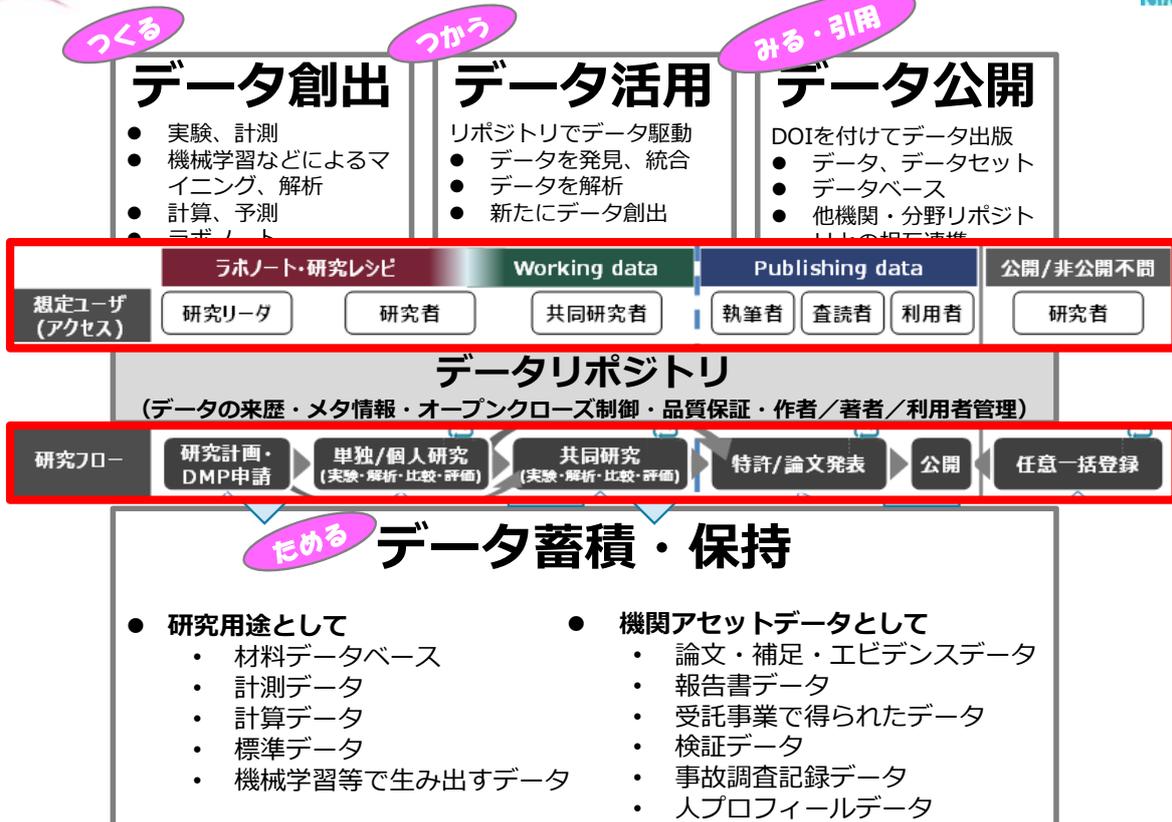
プロセッシング  
(溶かして固める)



相図  
(温度 & 化学成分と構造の相関図)



クリープ曲線  
(熱 & 応力環境下での伸びの時間変化)

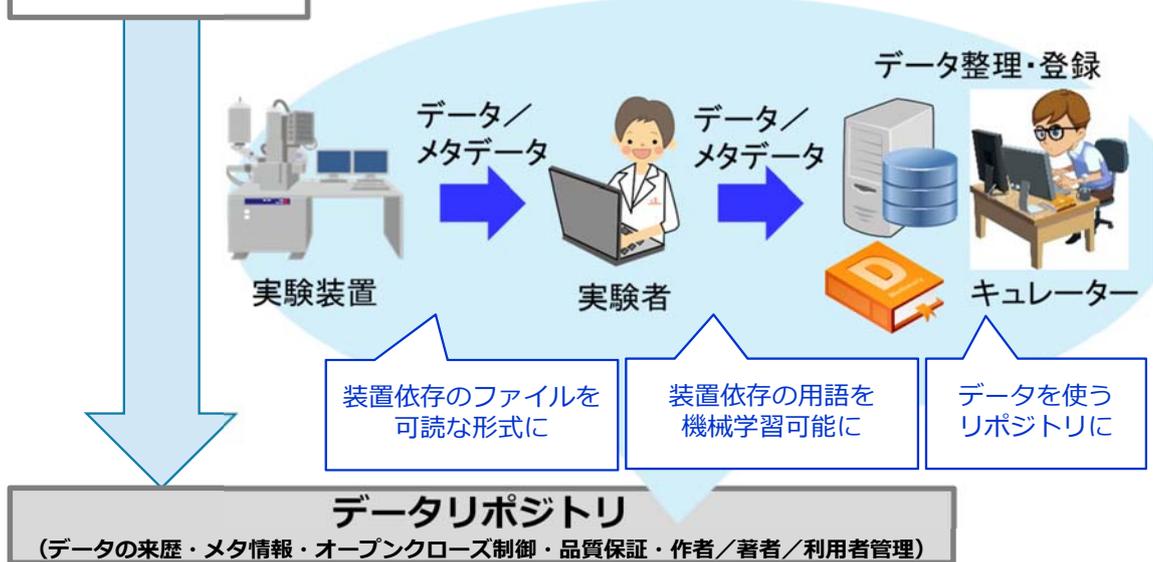


つくる

## データ創出

- 実験、計測
- 機械学習などによるマイニング、解析
- 計算、予測
- ラボノート

### 例：実験装置からデータを取る時



### 計測装置が出力する生データの可読性の低さの実例

#### 出力データの例

```
#@(#) AP_SFTA1
#@(#) AP_SFTA1
$AP_SYSTEM_ID AES-5.30
$AP_DATATYPE 3
$AP_ACQDATE 20150410163428
$AP_PENERGY 10.00
$AP_PCURRENT 1.006 8
$AP_CLCOARSE 6
$AP_CLFINE 221
$AP_OLAPERT 3
$AP_MAG 300
$AP_CHAMBER_PRESS 4.00 7
$AP_SPC_ANAMOD 5
$AP_SPC_ES 100
$AP_SPC_MESMOD 3
$AP_SPC_NCEM 7
$AP_SPC_CEMSTAT 1 0
$AP_SPC_CEMSTAT 2 1
$AP_SPC_CEMSTAT 3 1
$AP_SPC_CEMSTAT 4 1
$AP_SPC_CEMSTAT 5 1
$AP_SPC_CEMSTAT 6 1
$AP_SPC_CEMSTAT 7 1
$AP_SPC_CEMSTAT 8 1
$AP_SPC_CEMSTAT 9 0
$AP_SPC_SELDMOD 2
$AP_SPC_DMOD 1
$AP_SPC_PCCEMHV 2300
$AP_SPC_VFCEMHV 0
$AP_SPC_WSTART 0.00
```

Acquisition date ? 2015年04月10日 16時34分28秒 ?

Probe energy ? 10.00 keV ?

Probe current ? 1.006 E-8 A ?

Condenser lens fine tuning ? 221 ?

Objective lens aperture No. ? No. 3 ?

Chamber vacuum pressure ? 4.00 E-7 Pa ?

Spectral analyzer mode ? 5 ?

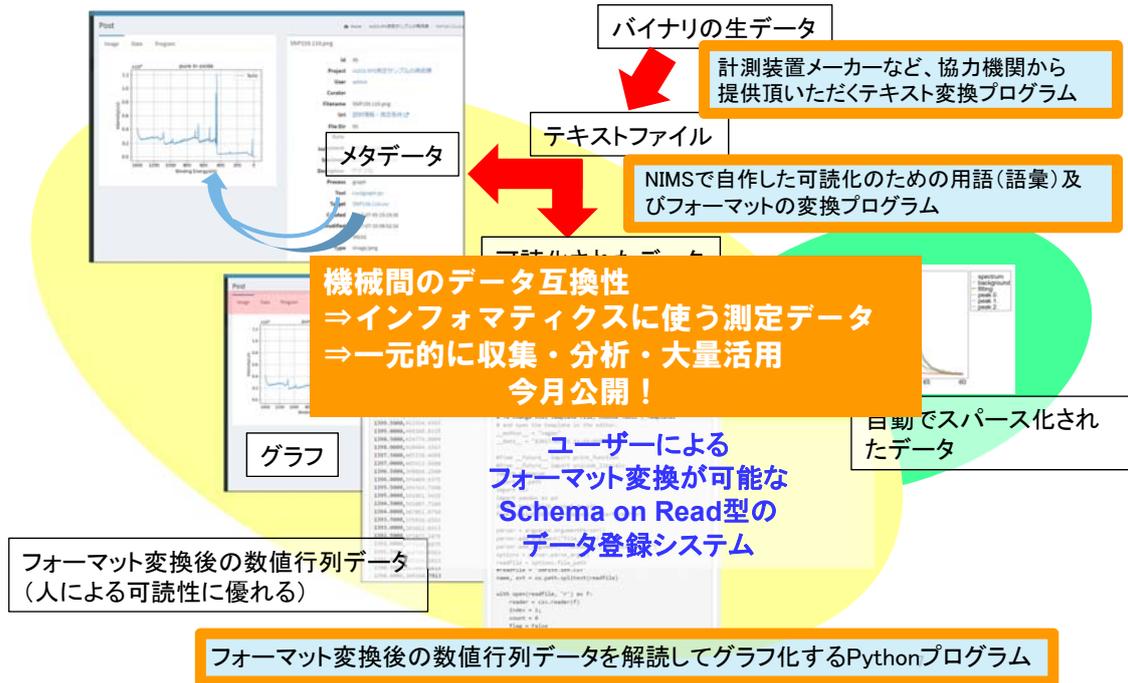
Measurement mode ? 3 ?

Number of channeltron electron multipliers ? 7 ?

Primary current ? /channeltron electron multiplier/  
high voltage ? 2300 V ?



実験装置が出力するデータを可読化することで、高付加価値化が可能に

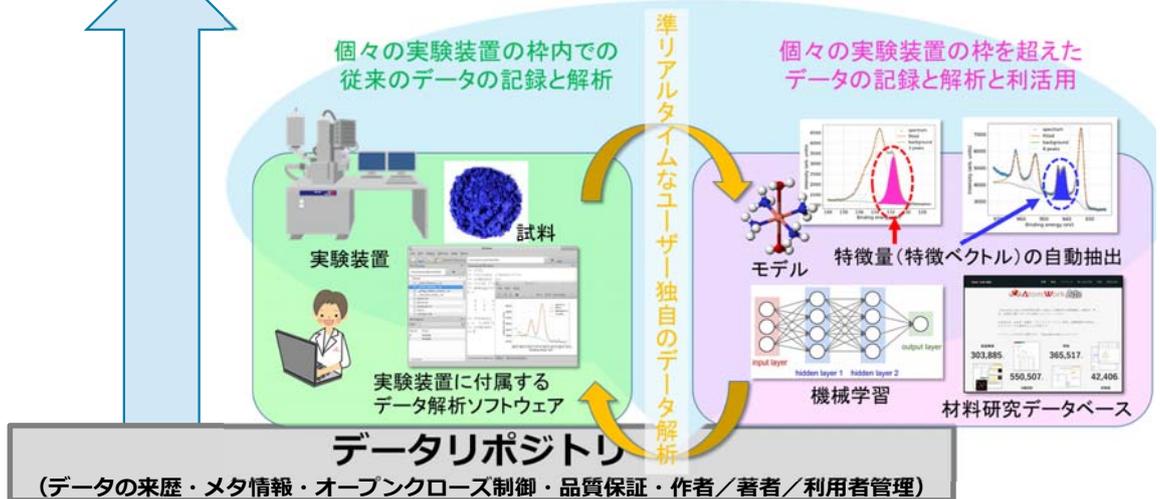


つかう

データ活用

- リポジトリでデータ駆動
- データを発見、統合
  - データを解析
  - 新たにデータ創出

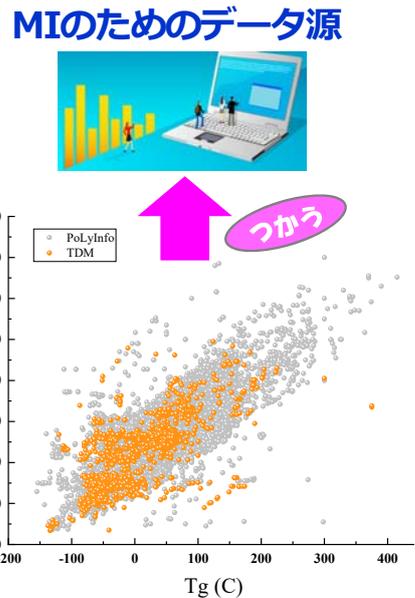
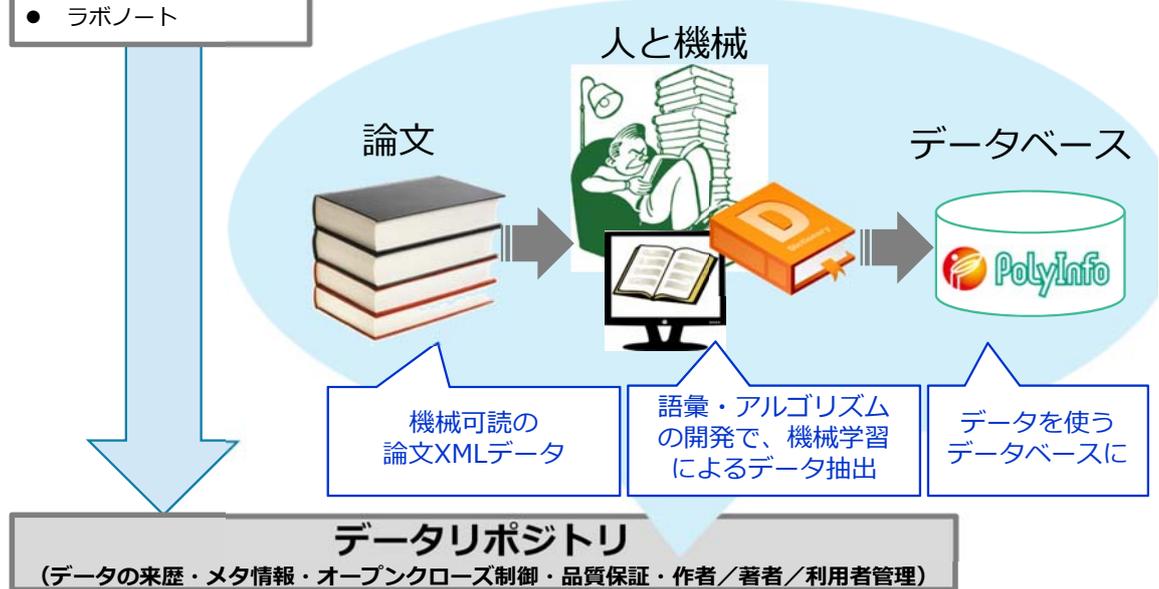
個々の実験装置の枠を超えた実験データの利活用へ



**つくる**  
**データ創出**

- 実験、計測
- 機械学習などによるマインニング、解析
- 計算、予測
- ラボノート

**例：論文からデータを取る時**



**機械と人の連携によるデータ源の拡大・活用を広げ  
潜在的情報資産の発掘から新規開拓へ**

### 試料のメタデータ

Material Type
Material Sub Category
Structural Features
Structure Sub Category
Specimen
CAS No. etc
purchase date (if needed)
supplier
Lot. No. / Product No. etc
物質タイプ
物質サブカテゴリー
構造的の特長
構造サブカテゴリー
試料
CAS番号等
購入年月日 (必要なら)
購入先
Lot. No. / Product No. 等

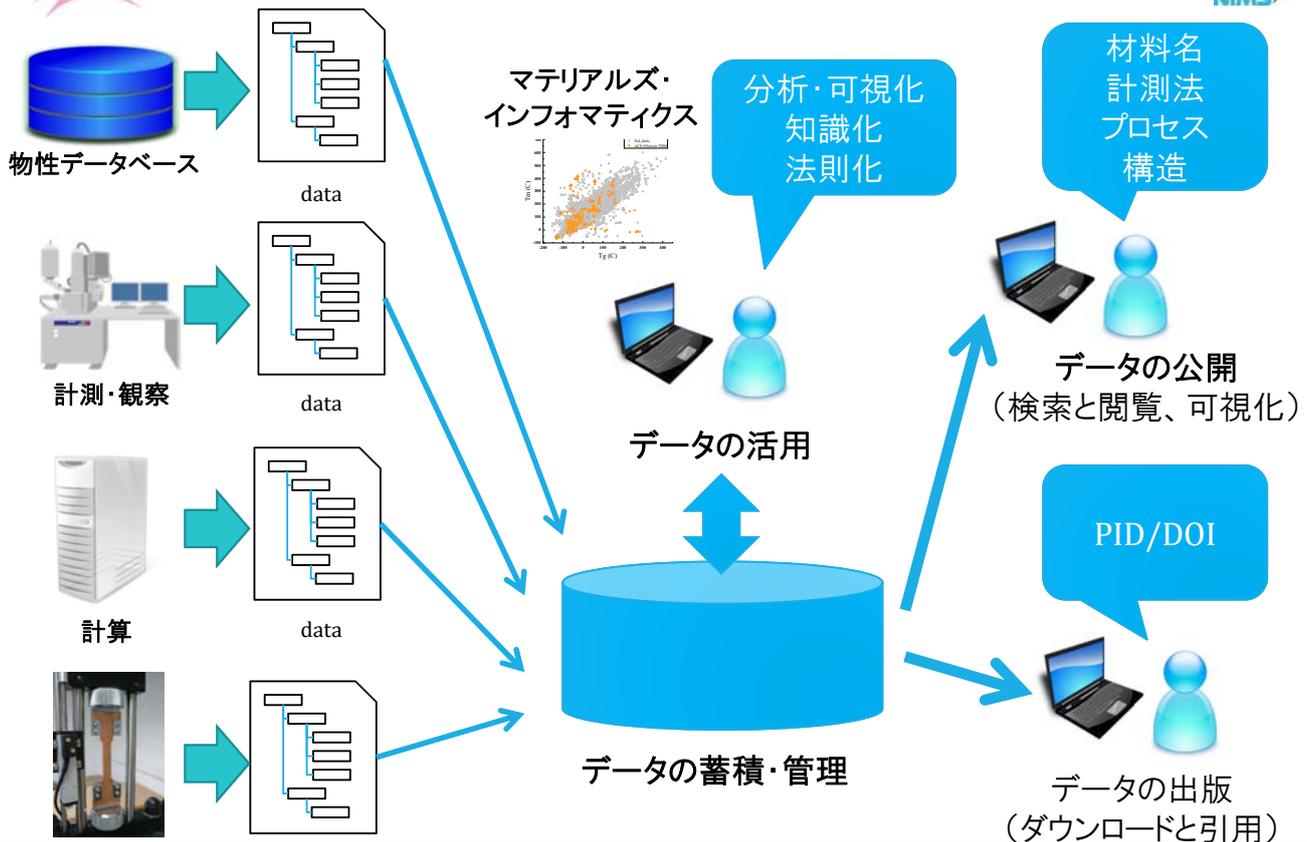
### 計測のメタデータ

Data origin
Method Category
Sub Category
Analysis field
Purpose(free description)
Specimen
Measurement environment
Energy Level Transition Structure etc. of inte
Measurement date
Standardized procedure (specified number)
Instrumentation site
Reference (if needed)(free description)
データの起源
計測法 カテゴリー
サブカテゴリー
分析分野
目的 (自由記述)
試料
測定環境
対象準位 遷移 構造
分析年月日
標準手順 (特定する番号)
装置設置機関
参考文献 (必要なら) (自由記述)

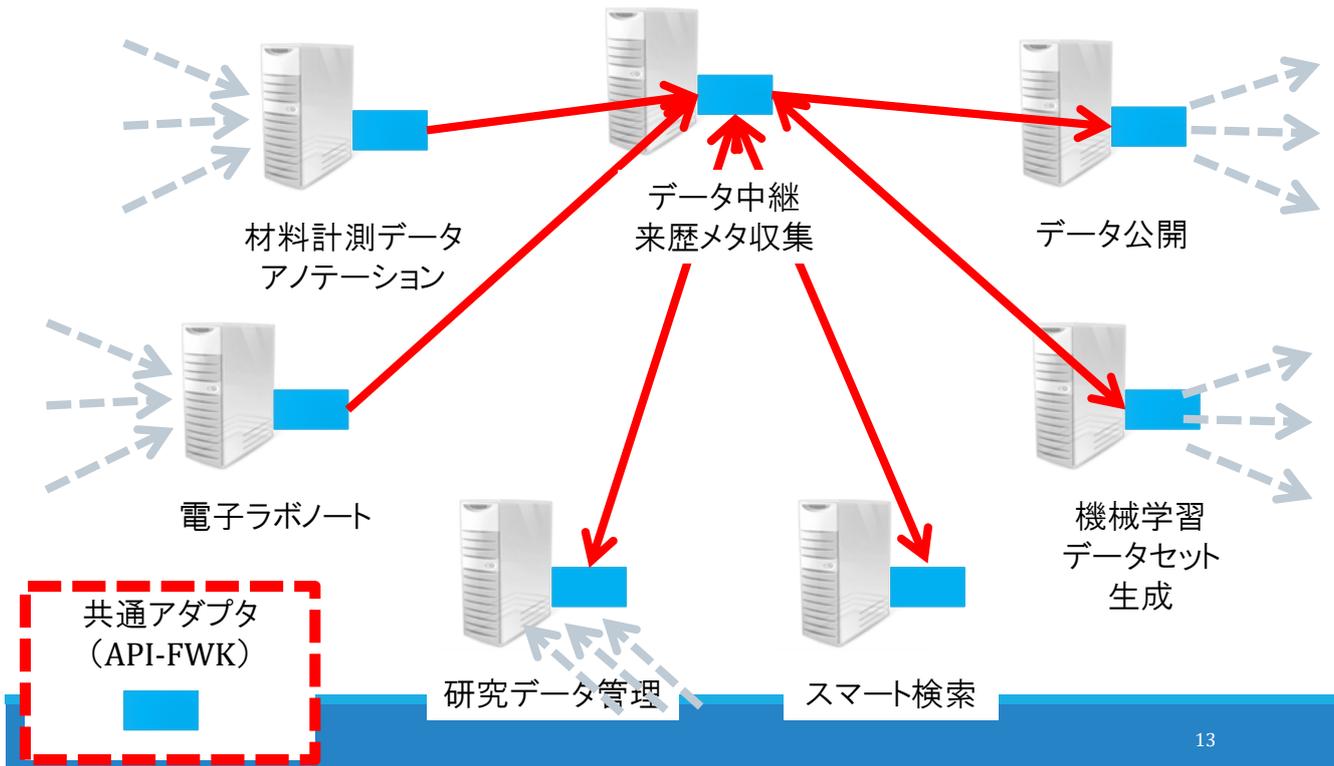
### 合成のメタデータ

date(yyyymmddhhmm)
process_category
process_technique
Processing Environment
Key Temperature (C)
Instrumentation site
Standardized procedure (specifiec
Description(free)
処理年月日(yyyymmddhhmm)
プロセスカテゴリー
プロセス手法
処理環境
主となる処理温度
装置設置機関
標準手順 (特定する番号)
付記事項(自由記述)

### MaDIS データプラットフォームシステムの構築



## 仮想マシン & 共通アダプタによる機能の連携 (マイクロサービスによる機能実現)



## MaDIS 組織連携 – organizational collaborations

Collaboration partners in a yellow oval: JAXA, SPring-8, Rigaku (Leading With Innovation), nanotechJapan (Nanotechnology Platform), and IMPACT (最新国内研究機関連携プラットフォーム).

Collaboration partners in a green oval: 内閣府 Cabinet Office, JST, 文部科学省 MEXT Scholarships, and RDUF Research Data Utilization Forum.



Materials Data Platform Center

**NIMS Roadmap**

- データポリシー / 2018 Aug
- データ管理DMP / 2019
- 方針と運用 / 2019-2020

Collaboration partners in a yellow oval: NIST, RDA RESEARCH DATA ALLIANCE, CERN, CORE TRUST SEAL, COAR Confederation of Open Access Repositories, and NEXT GENERATION REPOSITORIES.

**Data-Driven Science**  
データ駆動型研究と共に進展する  
データプラットフォーム

**データリポジトリ**  
 (データの来歴・メタ情報・オープンクローズ制御・品質保証・作者/著者/利用者と権限管理)

**研究・開発(R&D keywords for DPF)**  
 Materials Data Modeling, MetaSchema, JATS4R, PID, LinkedData, Voc, Ontology, RDF, GraphDB, SPARQL, Visualization, CAS, Security, Storage, Log analysis

- |   |  |   |  |
|---|--|---|--|
| <p><b>1. データの質</b></p> <p>だれが・いつ・どのような条件で⇒<br/>データ来歴情報を最低限のメタデータとして登録必須</p> | <p><b>2. データの量</b></p> <p>機械学習やインフォーマティクス⇒<br/>機械可読にためる・機械学習に使うデータサイクル</p> | <p><b>3. 適切な利用</b></p> <p>データ登録時に、<br/>利用ライセンスや契約⇒<br/>データを適切な条件で利用</p> | <p><b>4. 安全な環境</b></p> <p>利用規則⇒<br/>登録者・利用者は、<br/>予めの登録で身元確認</p> |
|---|--|---|--|
- 5. データプラットフォームという研究開発の発展の場**

  - データ形式を整えるツール、用語を変換する語彙などを提供
  - データを解析する環境を提供
  - 機械学習の時代に応えるデータ生成ツール、多様な用途のAPIを研究開発
- 先行するSIP-MI、MI2I-DPFのユースケースや経験を活かし  
次世代DPFの開発へ

**MaDIS**  
Materials Data Platform Center

# Appendix

# MaDIS シンポジウム

## AIで加速する材料開発とデータプラットフォーム戦略

2019.1.30 WED

要参加登録

[時間] 10:30-16:35 (10:00受付開始)

[場所] 東京ビッグサイト会議棟 レセプションホールB

特別講演: 田中 栄 (株式会社アクアビット)

未来予測2018-2030  
- 変貌する世界やビジネス、材料R&Dの新しい潮流 -

富谷 茂隆 (ソニー株式会社)

材料・デバイスものづくりプラットフォームにおける  
マテリアルズ・インフォマティクスの役割