

テーマ解説

金属材料データベースのデータモデル開発

松田 朝彦^{*1, †}, 出村 雅彦^{*1}, 森戸 伸昌^{*1}, 桑島 功^{*1}, 小野 嘉則^{*1, 2},
和田 健太郎^{*2}, 小松 誠幸^{*1}, 早川 正夫^{*2}, 日比 政昭^{*1}

Development of a Data Model for the Metallic Materials Database

Asahiko MATSUDA^{*1, †}, Masahiko DEMURA^{*1}, Nobumasa MORITO^{*1}, Isao KUWAJIMA^{*1}, Yoshinori ONO^{*1, 2},
Kentarō WADA^{*2}, Masayuki KOMATSU^{*1}, Masao HAYAKAWA^{*2} and Masaaki HIBI^{*1}

Synopsis: The National Institute for Materials Science (NIMS) has published Structural Materials Data Sheets since 1966. Some data sheets are also available through the online database application “Kinzoku,” which was updated in 2023 with a new unified data model. The Kinzoku data model was constructed by analyzing the implicit structure of long-accumulated data sheets, and by defining entities such as material, piece, properties, and test conditions, as well as their relationships and attributes. Three data formats were implemented based on this model: TSV for daily editing, PostgreSQL for ensuring data integrity and querying, and XML for semantic interoperability. This data model was applied in several scenarios, including an extension of the framework to support liquid hydrogen-related materials data, which is crucial for the development of hydrogen energy infrastructure.

Keywords: data format, data model, interoperability, materials database

(Some figures in this article may appear in colour only in the electronic version)

1. はじめに

物質・材料研究機構（NIMS）とその前身研究所は、1960年代から今日に至るまで、金属材料のクリープ・疲労・腐食・宇宙関連材料強度に関する各種の基礎的な試験を実施し、その結果を『構造材料データシート』シリーズとして刊行してきた¹⁻⁶⁾。同データシートに収録されたデータは産業界においても材料選択と強度設計の基準として広く活用されている。これらは長年冊子として刊行されていたが、2003年からはNIMS物質・材料データベースMatNaviの一環としてオンライン版が提供されている³⁻⁷⁾。「クリープデータシート」(CDS)と「疲労データシート」(FDS)由来のデータについては、検索や数値のプロット等が可能なウェブアプリケーション「Kinzoku」においても提供されてきた^{8,9)}。

その後、さらに広範なデータへの対応を視野に入れ、基盤となるデータモデルを再整理し、2023年にKinzokuを全面的にリニューアルした^{10,11)}。

一方、カーボンニュートラル社会の実現に向け、液化水素サプライチェーンの構築が進みつつある。NIMSでは最近、極低温水素環境での材料特性を系統的に評価できる試験設備を整備し、データ取得が開始された。ここで収集されるデータについても、CDS・FDSデータと同様に利活用しやすい形で蓄積できるよう、Kinzokuのものを拡張したデータモデルを定義した。対応するウェブアプリケーションも、Kinzokuを元にした追加開発により実装した。本稿ではKinzokuデータモデルとデータ形式¹¹⁾、ならびにそれらの設計思想について解説する。

2. なぜデータのモデル化が重要か

材料研究データは長年、各研究チームがそれぞれの目的に応じた独自の形式で管理してきた。日々のデータ管理の手段は紙媒体から電子的なスプレッドシートへと変化してきたが、形式は多くの場合独自のものであることは変わらない。近年では機械学習などデータ駆動型手法の発展により大規模データセットの価値が高まっているため、複数のチームのデータを組み合わせてそれを構築することが一般的になっている。しかし同じ試験のデータであっても、列

Received January 16, 2026

^{*1} (国研)物質・材料研究機構 技術開発・共用部門
〒305-0044 茨城県つくば市並木 1-1

Advanced Engineering and Services Division, National Institute for Materials Science, 1-1 Namiki, Tsukuba, Ibaraki, 305-0044, Japan

^{*2} (国研)物質・材料研究機構 構造材料研究センター
〒305-0047 茨城県つくば市千現 1-2-1

Research Center for Structural Materials, National Institute for Materials Science, 1-2-1 Sengen, Tsukuba, Ibaraki, 305-0047, Japan

[†] E-mail: MATSUDA.Asahiko@nims.go.jp

DOI: 10.2221/jcsj.61.170

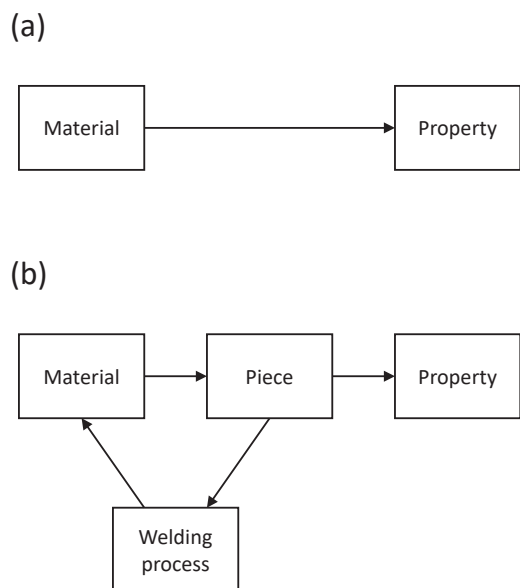


Fig. 1 (a) Data model where properties are directly tied to a material entity. (b) Data model where a 'piece' entity has been introduced between the material and the property, allowing for more complex representations. After Refs. 10, 11.

の配置・単位・試験条件の記載方法などはバラバラであることが多く、一筋縄ではいかない。では列を並び替えて単位を変換して揃えればいいのかというと、それだけではうまく統合できるとも限らない。ある情報をどの列に書くかがチームによって異なったり、自由記述的な文字列の取り扱いが問題になったりするためである。この事情の背後にある本質的な問題は、概念データモデル[すなわち、その研究にはどのような種類のエンティティ(実体)が存在し、それらがどのような関係性や属性を持つかという概念的な構造]が明示化されていないことにある¹²⁾。

例えば、あるチームでは「材料」に直接「特性」を紐付けているかもしれない(Fig. 1 (a))。しかし同じ材料でも、採取位置や熱処理条件によって特性が異なる場合がある。溶接継手のように、母材・溶接金属・熱影響部などといった異なる領域が一つの試験体に共存する場合はさらに複雑である。こうした状況を適切に表現するには、「材料」と「特性」との間に中間的なエンティティを設け、それらの関係を明確に定義する必要がある(Fig. 1 (b))。

概念データモデル設計作業には以下の要素が含まれる：

- ・エンティティの特定：対象領域の活動やデータ記述のためにどのような種類の実体が存在するかを定義する。「材料」「試験片」「試験条件」「機械的特性」「クリープ特性」など。
- ・関係の設計：エンティティ間の関係を定義する。「材料から試験片が採取される」「試験片に対して特性が得られる」など。
- ・属性の定義：各エンティティがどのような属性を持つ

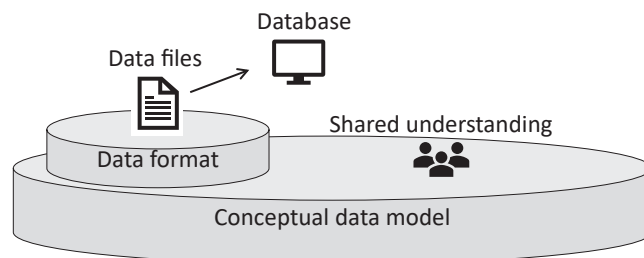


Fig. 2 Conceptual data model serves as the foundation upon which data formats are defined and databases are built. Shared understanding among stakeholders arises from a shared model, which may be explicit or implicit.

か定義する。「クリープ特性は破断時間を持つ」「疲労特性試験条件は波形種別を持つ」など。

こうした概念モデルの構築と共有により、異なるデータであっても同じ概念的枠組みの中で解釈・統合することが可能となる。

ここで、データモデリングに関して本稿で用いる用語を整理しておく。概念データモデル(conceptual data model)とは、対象領域においてどのようなエンティティが存在し、それらがどのような関係性や属性を持つかを記述したものである。これはデータベースの具体的な実装からは独立した、抽象的な概念の明確化である。一方データ形式(data format)とは、この概念モデルを具体的にどのような形で表現・格納するかという実装レベルの選択である。スキーマ(schema)は、特定のデータ形式における具体的な構造定義を指す。おおまかなイメージをFig. 2に示す。概念データモデルは関係者間の共通理解の基盤であり、データ形式やアプリケーションはその上に構築される。

材料試験方法については各種規格が存在し、試験手順の均一性を保証している。例えばクリープ試験についてはJIS Z 2271 および ISO 204、疲労試験についてはJIS Z 2273 および ISO 1099 などがある。これらの規格は、エンティティの区別や、「どのような量を測定すべきか」「どのような条件を記録すべきか」という属性の定義を規定していると言える。ただし当然、人間が読んで解釈することを前提としたものであり、形式的定義あるいは機械的可読性を持つものではない。またこれらは試験の実施方法を規定するものであり、得られたデータをどのような形で記録・保存するかというデータ形式やスキーマについて規定するものではない。

概念データモデルをさらに形式化・汎用化したものとしては、オントロジー(ontology)がある。オントロジーは、対象領域にどのような物事が存在しているかを成り立ちから解き明かし、基本概念やそれら同士の関係性を人間とコンピュータで共有できるように書き記したものである¹³⁾。異なるデータベースやシステムが共通の語彙を参照することで、相互運用性が確保される。材料に関するオントロジー

としては、Materials Ontology¹⁴⁾やEMMO¹⁵⁾などがあげられる。オントロジー工学は概念モデル化と相互運用性確保の徹底した実践であるとも言えるだろうが、その設計と運用にはやや急峻な学習曲線があることも否定できない。

材料データを統合的に記述するための形式として開発されたものにMatML (Materials Markup Language) がある¹⁶⁾。これは1999年にNIST (米国国立標準技術研究所) が開発を開始したXML (Extensible Markup Language) ベースの言語であり、材料の特性・試験条件・試験結果などを階層的に記述できるよう設計された。MatMLは概念データモデルとデータ形式の両方を一体として提供しようとした試みであったが、XMLの記述が複雑であることや、既存システムへの統合が容易でないことなどから、当初期待されたほどの普及には至らなかった¹⁷⁾。

こうした状況の中で、ボトムアップで実用的なデータモデルを構築すべく、NIMSが長年蓄積してきた構造材料データシートの構造を分析し、そこに暗黙的に存在してきた概念データモデルについて考察し、用途に応じた複数のデータ形式で実装したので、それについて次章で述べる。

3. Kinzoku のデータモデル

Kinzoku の概念データモデルは、NIMS クリープデータシート (CDS) と疲労データシート (FDS) の構造の分析を通じて構築された^{10,11)}。これらのデータシートは長年紙媒体として刊行されてきたものであり、必ずしも概念データモデルやスキーマといった用語を意識して設計されたわけではない。しかしながら、長年にわたる議論と実務の中で洗練されてきたこれらのデータシートには、暗黙のデータ構造が埋め込まれていた。

例えばCDSの典型的な構成を見してみる (Fig. 3)。最初に材料の詳細が記載され、続いて化学組成表、各試験温度における短時間引張特性、そして各試験温度・応力におけるクリープ破断データと続く。ここで注目すべきは、データの次元に応じて表が分離されている点である。硬さは典型的には室温で測定されるスカラーであり、材料の基本情報と同じ表に記載することが可能だ。しかし引張特性は試験温度の関数として、試験片と温度を軸にした別の構造の表が必要となる。クリープ破断データはさらに試験温度と応力の両方の関数として、複数の表で表現される。つまり、行・列・表というネスト構造にデータの次元数が反映されている。データの形は測定される物理量の性質から自ずと決まるものであり、データシートはそれを2次元の紙に落とし込まなければならない媒体的な制約からその構造が決まっているとも言える。

このようにして特定された主なエンティティタイプの一覧をTable 1に示す。ここで各エンティティには一意の識別子 (ID) を付与し、エンティティ間で参照が出来るようにした。例えば「宇宙関連材料強度データシート」⁶⁾ (SDS)

Common among typical Creep Data Sheets:

1. Details of materials

Columns	Example entry
Reference code	MBB
Type of melting	BEA (basic electric arc)
Size of ingot (kg or t)	4.85
Deoxidation process	Si-killed
Product form	Tube
Dimension (mm)	50.8 OD 8 WT 5000 L
Processing/thermal history	(omitted)
Grain size	7
Hardness	83
Non-metallic inclusion (%)	

2. Table of chemical composition

Requirements for each element (a column for each element)
a row for each reference code:
Chemical composition (mass %) (a column for each element)

3. Short-time tensile properties

a row for each reference code:
a column for each test temperature:
0.2% proof stress
Tensile strength
Elongation (%)
Reduction of area (%)

Data plots and regression lines

4. Creep rupture data

a table for each test temperature:
a row for each reference code:
a column for each stress:
Time to rupture (hours)
Elongation (%)
Reduction of area (%)

In some Creep Data Sheets:

Summary of rupture strength

- Rupture curve predicted from data points
- Temperature dependence of 0.2% proof stress, tensile strength, and creep rupture strength

Different tabulation of creep data

Data plots

- Stress versus time
- Time to rupture versus minimum creep rate

Microstructure photographs

Profile photographs of specimens

Supplementary data

- Specimen sampling
- Test methods
- Analysis and representation methods

Fig. 3 Analysis of typical content structure in NIMS Creep Data Sheets. After Ref. 11.

No. 18において718合金のデータが示されているという構造が、Data sourceとMaterialのIDに端的に表れている*。Pieceという中間層は、Materialから派生した、特性測定の対象となる実体を表す。PieceのIDは派生元のMaterial IDをまるごと含むようにした。Fig. 1で前述した際には中間層の意義として溶接継手対応をあげたが、FDSの分析からはその他にも、異なる熱処理、試験片の表面仕上げ、固溶化処理の有無、長手方向か横方向かの採取方向、試験片形状のバリエーションなど、多様な場面で中間層が意義を発揮した¹¹⁾。

次にこれらのエンティティ間に関係性を定義した (Fig. 4)。化学組成 (Composition) はMaterialに対して定義されるものであり、熱処理 (Heat treatment) はPieceに対して定義される。データベースの要とも言える各特性 (Properties)

* 厳密には、IDの形式などは概念データモデルの話とは呼べず、実装の具体的話である。本稿では理解を助けるため、具体例を交えて解説する。

Table 1 List of main entities and their ID format examples.

Entity type	ID example
Data source	D-NIMS-SDS-18
Material	M-NIMS-SDS-18-Alloy718
Composition	a)
Piece	P-M-NIMS-SDS-18-Alloy718-OA ^{b)}
Heat treatment	a)
Welding	W-NIMS-FDS-41-SAW ^{c)}
Tests	
Creep test	T-C-NIMS-CDS-C-1 ^{d)}
Tensile test	T-T-NIMS-FDS-41-1 ^{d)}
Elastic modulus test	T-EM-NIMS-FDS-83 ^{d)}
Fatigue test	T-F-NIMS-FDS-1-UNI-1 ^{d,e)}
Corrosion test	T-Co-NIMS-CoDS-1 ^{d)}
Properties	
Creep property	a)
Stress relaxation	a)
Tensile property	a)
Mechanical property	a)
Elastic modulus	a)
Fatigue (FS) ^{f)}	a)
Fatigue (LC) ^{f)}	a)
Fatigue (SC-CAT) ^{f)}	a)
Fatigue (SC-IST) ^{f)}	a)
Fatigue (FCP) ^{f)}	a)
Corrosion property	a)

Notes:

- Explicit IDs were not assigned to these entities as we found out that they are never referred to from other entities in practice. In the Kinzoku backend, IDs are generated upon data loading.
- OA: outside axial. Other patterns include OT: outside tangential; IR: inside radial; etc.
- SAW: submerged arc welding. Other patterns include GMA: gas metal arc welding; etc.
- T-C: creep test; T-T: tensile test; T-EM: elastic modulus test; T-F: fatigue test; T-Co: corrosion test.
- UNI: uniaxial. Other patterns include RB: rotating bending; TOR: torsion; etc.
- FS: fatigue strength; LC: load-controlled; SC-CAT: strain-controlled constant amplitude test; SC-IST: strain-controlled incremental step test; FCP: fatigue crack propagation.

は Piece に紐づく形で 11 種定義され、試験条件は 5 種の Tests として正規化した。

一般に、データベース設計においてはデータの冗長性を減らしデータ整合性を高めるために構造を正規化することが推奨される。試験規格・試験機・負荷波形などは Tests の属性として正規化した。一方、試験温度はあえて正規化しなかった。温度は試験の際の主要なパラメーターであり、各特性データと共に記録される方が自然だと判断したためである。例えばクリープ試験 (Creep test) としては JIS Z 2271 というクリープ試験方法の規格について記述される一方、クリープ特性 (Creep property) には試験温度・試験応力・破

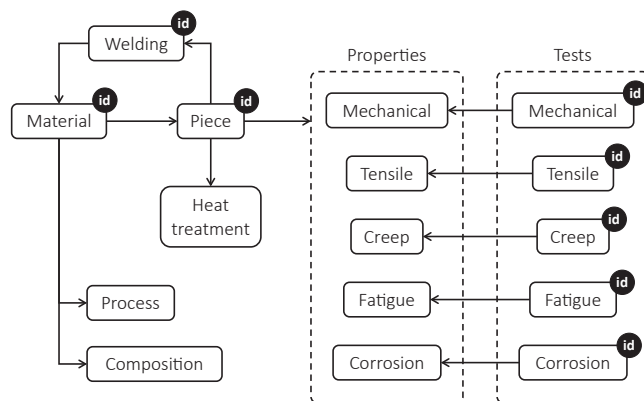


Fig. 4 Entities and their relationships, referenced by entity IDs.

断時間・伸び・絞り)が並ぶことになり、データの編集をより直感的にする効果があった。「何を正規化するか」という判断に唯一の正解はなく、実務的な都合も考慮してこの形に落ち着いた。重要なのは、判断を明示的に行って一貫して適用することである。

なお、このデータモデルは金属系材料の信頼性に関するデータを包括的に取り扱えるものであり、NIMS のデータシートに限らず、日本鉄鋼協会クリープ委員会が編纂したデータ集や米国試験材料協会データシリーズなど、NIMS 以外のデータも取り扱えるものであることを確認した¹¹⁾。

4. Kinzoku のデータ形式

このデータモデルを具現化する方法として 3 通りの形式を実装した：

- プレーンテキストベースの表形式 (TSV)
- リレーショナルデータベース (RDB)
- XML によるドキュメントストア

検証の結果、運用上は A と B を組み合わせて用いることとなり、C は研究目的での実装となった。以下で各形式の特徴を述べる。

4.1 プレーンテキストの編集容易性

データ管理における重要な要件として、人間が日常的に編集しやすいことを軽視してはならない。いかに優れたデータモデル・データ形式であったとしても、作業の障壁が高ければデータは更新されなくなるためである。これを第一の理由として、我々はプレーンテキストのタブ区切り形式 (TSV) を採用した。TSV は任意のテキストエディタで開くことができ、特別なソフトウェアやライセンスを必要としない。Microsoft Excel などのスプレッドシートソフトウェアを使わなかった理由は、数値の取り扱いにある。Excel は「0.80」という値を数値として解釈するため、表示上「0.8」に変換されて有効数字の情報を失う。試験データにおいて末尾の 0 は情報を持つので保持されるべきである。TSV を表形式で表示しつつも文字列として扱えるエディタ (EmEditor, Visual Studio Code, SmoothCSV など) を用いる

ことでこの件を回避できる。

第二の理由はバージョン管理である。プレーンテキストファイルはGitなどのバージョン管理システムで差分を記録・追跡しやすい。いつ、誰が、何を変更したかを記録し、必要ならば複数ブランチを同時に設け、いつでも任意の過去の状態に戻すことができる。

さて、このTSV形式¹⁸⁾では、エンティティタイプごとにそれぞれ独立したTSVファイルとして管理される(Fig. 5)。各ファイル1行目は列名、3行目が単位、2行目・4行目は作業用に利用する行であり(Fig. 5では割愛)、データ本体は5行目から始まる。各行はエンティティのインスタンスを表し、左の方の列には前章で述べたIDが主キーとして入る。エンティティ間の参照はこのIDを用いて行う。

この形式には限界もある。参照先IDが実在するか、数値が許容範囲内か、必須フィールドが埋まっているかと

いったデータ整合性の検証は、これのみでは行えない。そのためには別途プログラムを書くか、リレーショナルデータベースの制約機能に委ねることになる。

4.2 RDBの整合性と検索性能

リレーショナルデータベース管理システム(RDBMS)の利点は、データ整合性の保証とSQL(Structured Query Language)による強力な検索機能にある。外部キー制約により「存在しないMaterialを参照するPiece」などといった不整合を防止でき、インデックスにより高速な検索が可能となる。しかしデータ更新者がRDBMSを直接操作することは現実的ではない。SQLによるINSERT文やUPDATE文を手書きしてデータを更新する作業は、TSVの編集に比べるとスキルが要求される上に効率も劣る。

そこで我々が採用したアプローチは、TSVをソースデータとし、RDBをその派生物として扱うというものである。

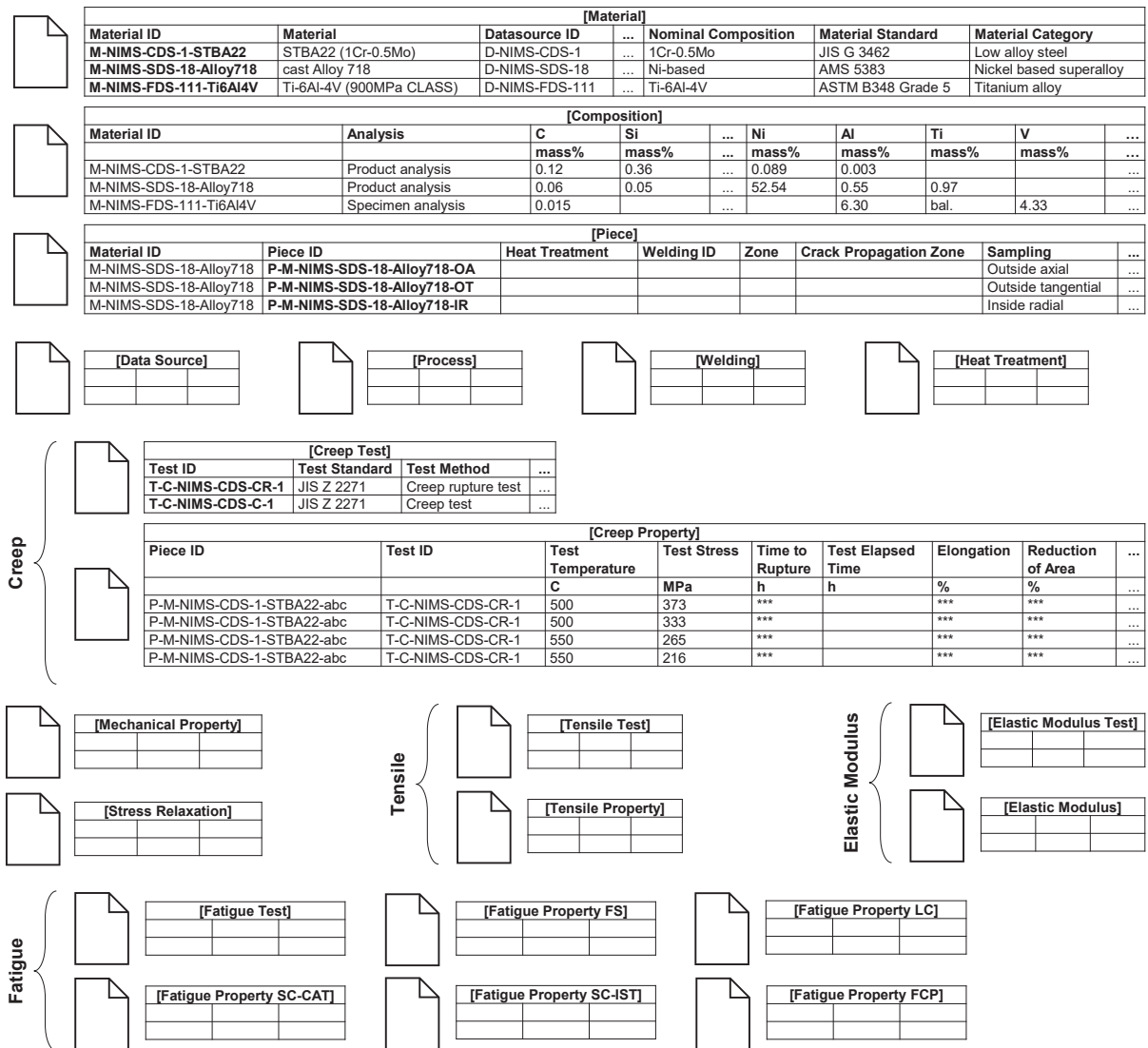


Fig. 5 TSV files in Kinzoku plain-text format, shown here as tables. The topmost lines in square brackets indicate the entity type and are not part of the actual files. Header rows and the primary identifiers are in bold. Only a selection of the columns is shown here; for the full list, see Ref. 18.

日常的なデータ編集はTSVファイルで行い、バッチプログラムによってTSVからPostgreSQLデータベースへ変換する。この方式により編集可能性とデータ整合性の両方を確保できた。

また、数値が期待される項目では、RDB上ではデータを2つの列(テキスト型と数値型)に冗長に格納することにした。TSVに`0.80`と記載されていれば、テキスト列には文字列`0.80`が、数値列には数値0.8が格納される。このほか、バッチプログラムにはデータシートの慣習を反映した変換規則を組み込んだ。例えば試験温度の`RT` (室温) は、テキスト列には`RT`として、数値列には25 (℃)として格納される。Compositionの`Trace` (微量) は数値列では便宜上0に、`Balance` (残部) は100 % から他の元素の合計を引いた値に変換される。範囲表記`12.0-15.0`は13.5に変換される。数値としての演算やプロットを可能にしつつ、表示上は元の記述やニュアンスを保持し、人が読むデータと機械が処理するデータの橋渡しを行った。

4.3 XMLと意味的記述

RDBとは対照的なアプローチとしてドキュメントストアがある。この形式では各エンティティの情報が独立したドキュメント(本実装ではXMLファイル)に格納され、RDBのように複数テーブルに分散しない。この形式の利点は柔軟性にある。RDBではテーブルのスキーマはすべてのレコードで共通でなければならない。しかし実際には、あるレコードにのみ存在する属性や、データソースによって異なる属性が存在することがある。ドキュメント形式では、必要に応じて各レコードに異なるフィールドを持たせることができる。

当XML実装¹⁹⁾ではルート要素を`<data>`とし、その下に`<material>`, `<process>`, `<structure>`, `<test>`, `<property>`という第一レベルの子要素を配置した。`<piece>`要素は`<material>`の子要素として含まれ、概念モデルにおける階層関係がXMLの構造に直接反映された。これは、RDBのテーブル群と比較して、より自己記述的な形式といえる。

さらに、XMLはオントロジーとの連携も容易である。当XMLスキーマは、芦野によるMaterials Ontology¹⁴⁾の拡張と並行して開発された。異なる組織が異なるスキーマでデータを管理している場合、単純なデータ形式の変換では統合できる保証がない。しかし両者が共通のオントロジーを参照していれば、意味的なマッピングが可能となり、他のシステムとの相互運用性が確保される。

5. モデルと形式の応用

5.1 Kinzoku ウェブアプリケーション

前章で述べたTSVを作業形式として、またPostgreSQLデータベースをバックエンドとして、ウェブアプリケーションKinzoikuを構築した(Fig. 6)。CDS・FDSに収録された材料特性データを検索・閲覧・可視化するためのイン

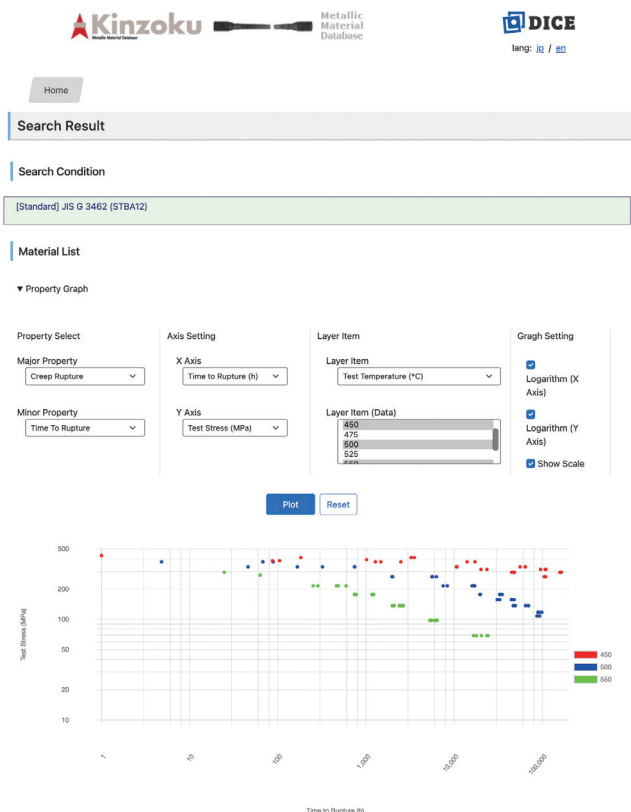


Fig. 6 The Kinzoku web application⁹⁾, implemented using the model and format described in this paper.

ターフェースを提供し、材料の規格・化学組成・収録特性などによる絞り込み検索、特性データの動的なグラフプロット機能などを実装した⁹⁾。

2010年にリリースした旧バージョンのKinzoikuは、CDS用、FDS用などと複数のデータモデルが並存する構造であった。これは当時の実情を反映したものであったが、2023年にリリースした新バージョンでは、本稿で述べた統一データモデルに基づく単一のスキーマに置き換えた¹¹⁾。これにより、異なるデータシート間での材料検索などがより柔軟になった。

5.2 機械学習でのデータ活用

本データモデルに基づいて整備されたデータセットは、機械学習によるクリープ破断寿命予測に活用された。この応用を通じて、データモデルの設計がデータ駆動型研究に与える影響について、いくつかの知見が得られた。

第一に、試験片IDの存在がデータセット構築において有用であった。機械学習では、訓練データとテストデータを適切に分割することが重要である。同一材料から採取された試験片のデータが訓練とテストの両方に含まれると、モデルの汎化性能を過大評価するリスクがある。試験片IDを用いた層化サンプリングにより、こうした問題を回避できた^{20,21)}。

第二に、複数組織のデータを用いた連合学習(federated learning)において、共通のデータモデルが不可欠であった。

連合学習では、各組織はそれぞれのデータを秘匿したまま、モデルパラメータのみを交換して協調的に機械学習を行う。8組織が参加したクリープ破断時間予測プロジェクトでは、本データモデルからさらに議論を深めて定義した共通形式が組織間の協調を可能にした²²⁾。

これらは、データモデルの設計が単なる整理整頓ではなく、データの活用可能性を左右する要素であることを示している。

5.3 液化水素環境材料データベース

液化水素環境下での材料特性データは水素エネルギーインフラの安全設計に不可欠である。NIMSでは極低温水素環境での材料特性を評価できる新たな試験設備を整備し、データ取得を開始した。そこで、Kinzoの概念データモデルを拡張し、そのデータを扱えるように整備した。基本的なエンティティ構造はそのまま踏襲し、極低温特有の試験条件や特性項目を追加する形で対応した。ウェブアプリケーションについてもKinzoをベースに追加開発を行った。新設備で得られたデータをこの形式に変換することで、GUIでの横断的検索やグラフプロットが可能になった(当面はグリーンイノベーション基金事業の関係者に限り公開予定)。将来的には、前述のようなデータ駆動型研究での利活用も期待できる。

概念データモデルが明確に定義されていたことで、この拡張は比較的容易であった。詳細は別稿に譲るが、本事例はデータモデルを構築し、データ形式を定めることの実務的な利点を示すものである。

6. まとめと今後の展望

NIMS金属材料データベースKinzoの基盤として開発したデータモデルとデータ形式について解説した。長年蓄積されてきた構造材料データシートの構造分析をもとに概念データモデルを定め、異なるデータソースを統一的に扱える枠組みを構築した。データ形式としては、日常的な編集作業に適したTSV、データ整合性保証と検索性能に優れたRDB、柔軟性と意味的記述に適したXMLという3種の実装を行い、各特性に応じて使い分けている。これらの形式間の変換は、概念モデルが一貫しているからこそ容易である。

Kinzoのデータモデルとデータ形式は既存データシート資産の分析から構築されたものであるが、その枠組みが液化水素環境材料データにも拡張可能であることを述べた。このように、新たにデータを蓄積していく際には、明確な概念データモデルに基づいて整備することで、将来のデータ統合や機械学習への応用が容易になる。

今後の展望として、生成AIの一種である大規模言語モデル(LLM)を用いたデータ連携が挙げられる。最近、LLMに外部情報源を接続し、それに基づいた回答を生成させるRetrieval-Augmented Generationと呼ばれる手法が用いられ

るようになってきた²³⁾。材料データベースでこの手法を利用する際にも、データモデルが明確に記述されていることは重要である。良いデータモデルの整備とドキュメント化は、人間によるデータ管理や従来の機械的データ処理だけでなく、AIによるデータ活用の基盤としても機能するものと考えられる。

本成果の一部(基礎データモデル開発)は、内閣府総合科学技術・イノベーション会議の戦略的イノベーション創造プログラム(SIP)「統合型材料開発システムによるマテリアル革命」(管理法人:JST)、文部科学省データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト事業JPMXP1122684766の助成およびNIMS構造材料DX-MOPの枠組みのもと実施したものである。液化水素環境材料データベースは、グリーンイノベーション基金事業の課題として国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構(NEDO)からの委託業務により開発したものである。

参 考 文 献

- 1) K. Sawada, et al.: "Catalog of NIMS creep data sheets," *Sci. Technol. Adv. Mater.* **20** (2019) 1131-1149
- 2) Y. Furuya, et al.: "Catalogue of NIMS fatigue data sheets," *Sci. Technol. Adv. Mater.* **20** (2019) 1055-1072
- 3) National Institute for Materials Science, "Creep data sheet," *MatNavi*, <https://cnds.nims.go.jp/> (accessed 2025-12-19)
- 4) National Institute for Materials Science, "Fatigue data sheet," *MatNavi*, <https://fds.nims.go.jp/> (accessed 2025-12-19)
- 5) National Institute for Materials Science, "Corrosion data sheet," *MatNavi*, <https://cods.nims.go.jp/> (accessed 2025-12-19)
- 6) National Institute for Materials Science, "Space use materials strength data sheet," *MatNavi*, <https://sds.nims.go.jp/> (accessed 2025-12-19)
- 7) M. Yamazaki, Y. Xu: "NIMS Materials Database and its search engine," *J. Inf. Sci. Technol. Assoc.* **59** (2009) 177-182 (in Japanese)
山崎政義, 徐 一斌: 「NIMS物質・材料データベースとその検索エンジン」, *情報の科学と技術* **59** (2009) 177-182
- 8) M. Yamazaki, et al.: "NIMS metallic materials database: Kinzo," *The 4th Asian Materials Data Symposium* (2014)
- 9) National Institute for Materials Science, "Metallic materials database (Kinzo)," *MatNavi*, <https://metallicmaterials.nims.go.jp/> (accessed 2025-12-19)
- 10) M. Demura: "Design of materials data structure: How to balance between management and utilization," *J. Soc. Inorg. Mater. Jpn.* **30** (2023) 304-309 (in Japanese)
出村雅彦: 「マテリアルデータ構造の設計: 管理と活用のバランスをいかに取るか?」, *J. Soc. Inorg. Mater. Jpn.* **30** (2023) 304-309
- 11) A. Matsuda, et al.: "A unified model for metallic materials reliability data and its application in NIMS metallic materials database (Kinzo)," *Sci. Technol. Adv. Mater. Methods* **5** (2025) 2518745
- 12) M. Scheffler, et al.: "FAIR data enabling new horizons for materials research," *Nature* **604** (2022) 635-642
- 13) 溝口理一郎: 「オントロジー工学」, オーム社, 東京 (2005)
- 14) T. Ashino: "Materials Ontology: An infrastructure for exchanging materials information and knowledge," *Data Sci. J.* **9** (2010) 54-61

- 15) P. D. Nostro, et al.: "Elementary Multiperspective Material Ontology: Leveraging perspectives via a showcase of EMMO-based domain and application ontologies," *Proceedings of the 16th International Joint Conference on Knowledge Discovery, Knowledge Engineering and Knowledge Management* **2** (2024) 135-142
- 16) C. P. Sturrock, E. F. Begley, J. G. Kaufman: "MatML - Materials Markup Language workshop report," NIST IR 6785, National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD (2001)
- 17) T. Austin: "Towards a digital infrastructure for engineering materials data," *Mater. Discov.* **3** (2016) 1-12
- 18) A. Matsuda, et al.: "Supplemental data to 'A unified model for metallic materials reliability data and its application in NIMS metallic materials database (Kinzo)," MDR: NIMS Materials Data Repository (updated 2025-08-01) <https://doi.org/10.48505/nims.5449> (accessed 2025-12-23)
- 19) T. Ashino, et al.: "Implementation of materials data integration using ontology," *Supplementary Proceedings of the XXIII International Conference on Data Analytics and Management in Data Intensive Domains (DAMDID/RCDL 2021)* **3036** (2021) 235-239
- 20) J. Sakurai, et al.: "Creep life predictions by machine learning methods for ferritic heat resistant steels," *Tetsu-to-Hagane* **108** (2022) 424-437 (in Japanese)
櫻井惇也ら:「機械学習によるフェライト系耐熱鋼のクリープ破断寿命予測」, *鉄と鋼* **108** (2022) 424-437
- 21) J. Sakurai, et al.: "Creep life predictions by machine learning methods for ferritic heat resistant steels," *ISIJ Int.* **63** (2023) 1786-1797
- 22) J. Sakurai, et al.: "Federated learning of creep rupture time and high temperature tensile strength prediction models," *Tetsu-to-Hagane* **111** (2025) 246-262 (in Japanese)
櫻井惇也ら:「クリープ破断時間および高温引張強度予測モデルの連合学習」, *鉄と鋼* **111** (2025) 246-262
- 23) P. Lewis, et al.: "Retrieval-augmented generation for knowledge-intensive NLP tasks," *Advances in Neural Information Processing Systems (NeurIPS 2020)* **33** (2020) 9459-9474

松田 朝彦 2013年京都大学大学院航空宇宙工学専攻博士後期課程修了。2015年より物質・材料研究機構(NIMS)勤務。2023年よりNIMS技術開発・共用部門にて材料データベース業務に従事。応用物理学会会員。博士(工学)。

出村 雅彦 1995年東京大学大学院工学系研究科材料科学専攻修士課程修了, 同年科学技術庁金属材料技術研究所(現NIMS)入所。2003年6月博士(工学)取得(東京大学)。2023年NIMS技術開発・共用部門長。日本金属学会会員。博士(工学)。

森戸 伸昌 2012年工学院大学工学部第1部環境化学工学科卒業。2023年より物質・材料研究機構(NIMS)技術開発・共用部門にて金属材料データベースに従事。

桑島 功 2000年工学院大学大学院工学研究科工業化学専攻修士課程修了。2002年より物質・材料研究機構(NIMS)にて材料データベース業務に従事。2023年技術開発・共用部門材料データPFデータ収集ユニットリーダー。高分子学会会員。

小野 嘉則 2001年九州大学大学院工学研究科博士後期課程修了, 同年よりNIMS勤務。現在NIMS技術開発・共用部門極限環境材料データユニットリーダーおよび構造材料研究センター極低温疲労グループ主幹研究員として極限環境における材料力学特性評価と変形・破壊研究に従事。低温工学・超電導学会, 日本金属学会, 日本鉄鋼協会。博士(工学)。

和田 健太郎 2020年九州大学工学府水素エネルギーシステム専攻博士後期課程修了。同年より福岡大学工学部助教。2022年よりNIMSにて低温・水素環境における金属材料の力学特性に関する研究に従事。日本材料学会会員。博士(工学)。

小松 誠幸 1999年筑波大学第一学群自然科学類卒業。2007年より物質・材料研究機構勤務。日本鉄鋼協会, 日本材料学会, 低温工学・超電導学会会員。

早川 正夫 1992年科学技術庁金属材料技術研究所入所。2003年(在職まま)九州大学大学院先端エネルギー理工学専攻博士(工学)。2011年物質・材料研究機構疲労研究グループリーダー。現在同構造材料研究センター極低温疲労グループリーダー。日本金属学会, 日本鉄鋼協会, 日本ばね学会, 日本高圧力技術協会, 日本機械学会会員。博士(工学)。

日比 政昭 1980年早稲田大学大学院理工学研究科応用化学専攻博士課程前期修了, 同年新日本製鐵(現日本製鉄)入社。2022年NIMS特別研究員。日本鉄鋼協会会員。