

情報統合型物質材料研究を支えるデータプラットフォームの構想

物質・材料研究機構、徐一斌

Xu.yibin@nims.go.jp

情報科学の解析手法を用いて、大量の材料データから材料の組成、加工プロセス、構造、特性、パフォーマンス間の関連性を見つけ出し、新材料の特性予測や、組成・構造などの設計によって、新材料の開発を加速させる手法が、これからの材料研究のブレイクスルーとして注目されている。このような情報統合型物質・材料研究（**Materials Research by Information Integration: MI²**）を支えるのは、大量の材料データの高速な収集、効率的な管理、正確に提供するビッグデータインフラストラクチャである。従来型のデータベースと比べて、ビッグデータをコンセプトとしたインフラシステムは、下記の特徴がある：

- 1) 全ての材料データを対象として、網羅的に、タイムリーに収集する。
- 2) 材料の分類や応用などの範疇を超えてクロス検索とデータの組合せができる。
- 3) プリ・ポストのデータ加工、シミュレーション、データ解析、機械学習などのソフトウェアとシームレスに接続可能。

物質・材料研究機構（NIMS）は、2002年から、無機材料、高分子、構造材料の基礎データとエンジニアリングデータをデータベース化したシステム **MatNavi** を構築してきた。これからは、MI²の基盤となるデータプラットフォームの構築も担当する。本講演は、NIMS 材料データベースの長年の開発、運用管理、サービス提供で得られた経験および直面している問題点を分析した上で、それに基づいた MI² プラットフォームの設計思想、将来像、およびそれを実現するためのアプローチについて述べる。

参考資料

- [1] NIMS 物質・材料データベース MatNavi : <http://mits.nims.go.jp/>.