Journal of Surface Analysis, Vol. 27 No.2 (2021) pp. 95 - 103
吉武道子 マテリアルキュレーション® 支援システムの教育・研修用展開および計測法とのリンク拡張
https://doi.org/10.1384/jsa.27.95

技術報告

マテリアルキュレーション®支援システムの教育・研修用展開および計測法とのリンク拡張

吉武 道子 [1,*]
[1] *物質・材料研究機構 〒305-0044 茨城県つくば市並木 1-1*
* *yoshitake.michiko@nims.go.jp*

（2020 年 6 月 10 日受理；2021 年 1 月 10 日掲載決定）

物性間の関係についての科学法則をネットワーク型の知識データベースとし，その関係性を探索できる「マテリアルキュレーション®」支援システムについて，教育・研修用に特化した場合の改造と，各物性とその値の計測法を結びつけたシステムへの拡張について報告する．物性間関係図を教育・研修用とするために，習得させたい重要な部分について物性間関係図に意図的に空欄を作成する仕組みの設計を行い，空欄を関係性のネットワーク構造のグラフ理論的特徴を基に作成する方法を開発した．各物性とその値の計測法との連結に関しては，物性間の関係性が記述されたネットワーク型データベースとは独立して物性計測法のデータベース（リスト型）を作成し，各計測法が，その方法によって計測できる物性（物性間関係図のデータベースの中にある）とリンク付けする設計とした．

Developing a Materials Curation® Support System for Education and Training, and Expanded Links with Measurement Methods Database

Michiko Yoshitake[1,*]
[1] *National Institute for Materials Science, 1-1 Namiki, Tsukuba, Ibaraki, 305-0044 Japan*
* *yoshitake.michiko@nims.go.jp*

(Received: June 10, 2020; Accepted: January 10, 2021)

‘Materials Curation® support system’, which has a network-type knowledge database of relations among material properties and enables a search of the relations, are modified for education and training. The characteristic feature is that there are intentional blanks in the database so that learners can fulfill the blanks. An addition of a database of material property measurement methods, having links with material properties in the database of relations among material properties is also mentioned.

1. はじめに

材料の研究開発は，多くの場合，物理学・化学分野の科学法則に立脚している．しかしながらその分野は広く，自身が取り組む材料開発に必要な科学法則のすべてに一人で精通することは困難である．著者らは，科学法則の知識データベースも含めた材料情報を分野横断的に活用して材料探索を行う手法であるマテリアルキュレーション®を提唱している[1]．科学法則を利用すると，マテリアルズインフォマティクスで行われているような大量な数値データが入手できない場合でも材料探索すべき方向性を見つけることができる．多くの人が科学法則を利用することができるように，物性間の関係性（例えばギブスエネルギーと酸化還元電位の関係）を Fig.1 のよう

Copyright（c）2021 by The Surface Analysis Society of Japan

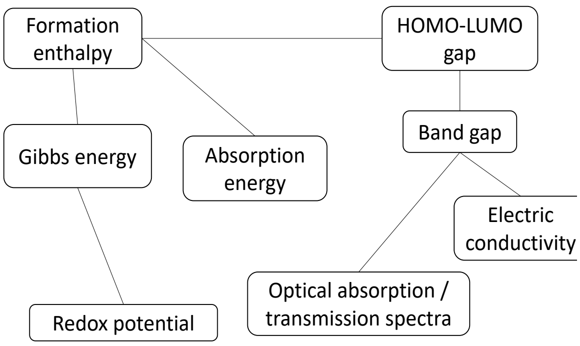


Fig. 1. Network type diagram that shows relations between material properties (no numerical data of material properties included).

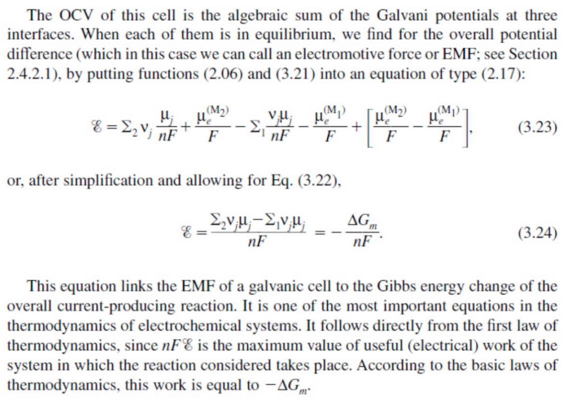
なネットワーク状の関係図の形でデータベース化し，ある物性がどの物性とつながっているかを探索することができるシステムを開発している．概念提示のデモシステムについては文献[２]に報告している．また，科学法則の知識データベース化を半自動的にコンピュータに実施させる，より実用化に近いプロトタイプを企業との共同研究により開発し，「マテリアルキュレーション支援システム」と呼んでいる[3, 4].

本報告では，この物性間関係性探索システム（＝科学法則の知識データベース探索システム）を改造して，教育・研修に用いる際に適したシステムとする方法について述べる．また，先の報告[4]において査読者から質問のあった，物性の値の計測法との関係性についても述べる．

2. 物性間関係図とその使い方

2.1 物性間関係図

物性間関係図とは，例えば，教科書に Fig.2 のような記述[5]があったとする．その中で，”This


The OCV of this cell is the algebraic sum of the Galvani potentials at three interfaces. When each of them is in equilibrium, we find for the overall potential difference (which in this case we can call an electromotive force or EMF; see Section 2.4.2.1), by putting functions (2.06) and (3.21) into an equation of type (2.17):

$$\mathscr{E} = \Sigma_2 \nu_j \frac{\mu_j}{nF} + \frac{\mu_e^{(M_2)}}{F} - \Sigma_1 \frac{\nu_j \mu_j}{nF} - \frac{\mu_e^{(M_1)}}{F} + \left[\frac{\mu_e^{(M_2)}}{F} - \frac{\mu_e^{(M_1)}}{F} \right], \quad (3.23)$$

or, after simplification and allowing for Eq. (3.22),

$$\mathscr{E} = \frac{\Sigma_2 \nu_j \mu_j - \Sigma_1 \nu_j \mu_j}{nF} = -\frac{\Delta G_m}{nF}. \quad (3.24)$$

This equation links the EMF of a galvanic cell to the Gibbs energy change of the overall current-producing reaction. It is one of the most important equations in the thermodynamics of electrochemical systems. It follows directly from the first law of thermodynamics, since $nF\mathscr{E}$ is the maximum value of useful (electrical) work of the system in which the reaction considered takes place. According to the basic laws of thermodynamics, this work is equal to $-\Delta G_m$.

Fig. 2. An example of relations between materials properties appearing in a textbook.

equation links the EMF of a galvanic cell to the Gibbs energy change of the overall current-producing reaction.” というフレーズから，EMF と Gibbs energy change との間に関係性があると見つけ出し，結びつける．このような結びつけを多くの教科書の多くの記述から行い，Fig.1 に示した項目よりも非常に多くの物性とその間の関係を結びつけた物性間関係図が作成できる．プロトタイプには，9 冊の教科書を用いて約 2000 個の物性間を関係づけた関係性データが格納され，関係性の探索が可能となっている．なお，教科書のフレーズに EMF のように略号で表記されたり”it”や”this”のように指示代名詞が使われたりしている場合には，文章の前の部分も解析して略号や指示代名詞が何を指しているのかを見つける工程が入っている．

なお，Fig.2 の例の様に関係性が数式で記述されている場合には，直接数式から関係性を見つけることも可能で，その技術については現在開発中である[6,7].

2.2 物性関係図の使い方

最も基本的な物性関係図の使い方は，Fig.3(a)に示すように，ある物性 M が他のどのような物性と関係しているかを知ることである．Fig.3(a)においてグレイで表示している物性は M と直接関係，白丸の物性は 2 つの繋がりを経由して M と関係，破線の丸は M と 3 つの繋がりを経由して関係しており，それぞれの物性は相互に関係しあっている，ということが分かる．その他，「物性 A（例えばバンドギャップ）の値を大きくしようと材料を変えたら，物性Aの値は大きくなったが，予期せずに物性Bの値が小さくなり不都合が生じた」というような場合に，Fig.3(b)に示すように，物性 A と物性 B との間の繋がりを探索して，その経路に存在する物性から，どうして物性Bの値が小さくなったのかを知る，などの利用が可能である．なお，Fig.3(b)中の太線は A－B 間の最短の繋がり（2：A-N-B）関係を，破線は 3 つの繋がりを経由する関係（A-N-F-B，A-C-F-B，A-K-E-B）を示す．また，A－B 間の繋がりのどこかに，ある物性 H が含まれているかどうか（物性 H が A と B の両方の物性に影響を与えるか）を探索することも可能である．具体的には，A－B 間の繋がりを全てリストアップし，その繋がりの中（A-N-F-B というような）に H が含まれるかどうかで判断できる．

さらに，Fig.3(c)に例示するように，「物性 X の値

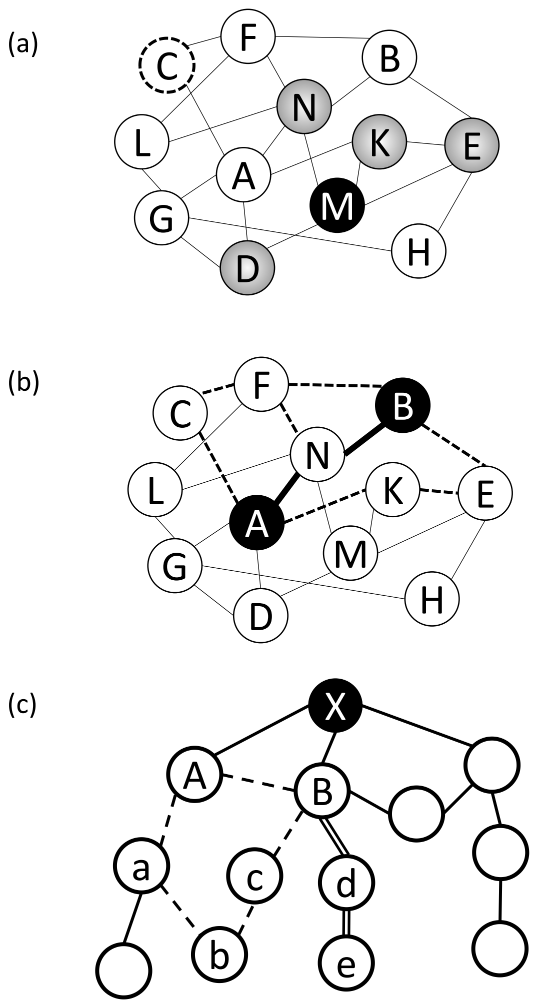


Fig. 3. Examples of graph search.

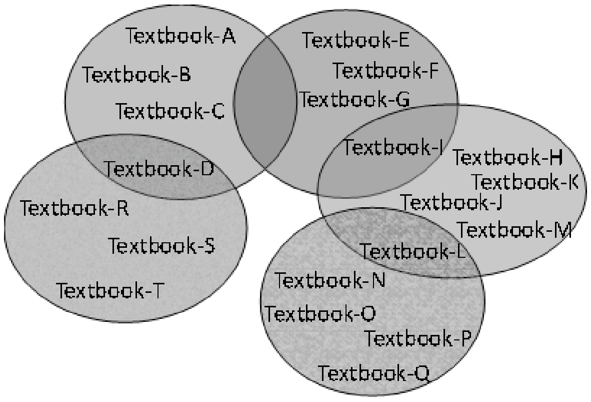


Fig. 4. An example of grouping textbooks for modifying property relationship database on demand.

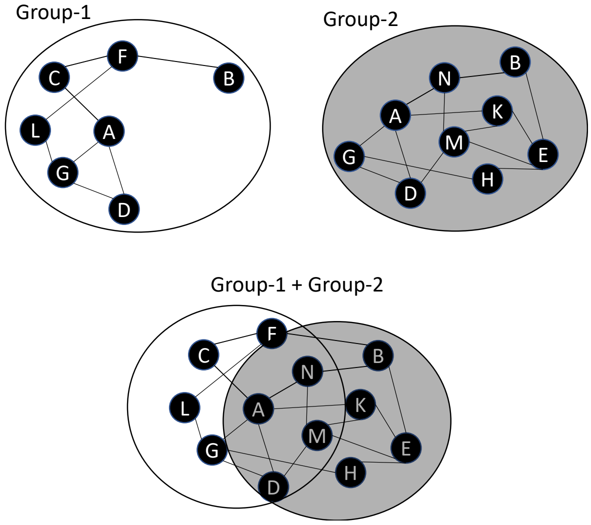


Fig. 5. Schematic illustration of addition of two graphs.

を大きくするために，物性 A と物性 B の両方の値を大きくしたいが，物性Aの値を大きくしたら物性 B の値が小さくなり不都合が生じた」というような場合，物性 B とつながっているが物性 A とはつながっていない物性 d を探索し，物性 d を変化させることで物性Bの不都合な小さい値を解消する，などのように利用することもできる．

以上に述べたような利用方法は，すべてグラフ理論のアルゴリズム[8]を用いて行うことができ，そのアルゴリズムは物流や回路設計など様々な分野で既に長年利用されている．また，汎用プログラミング言語である Python の NetworkX や Neo4j などの様々な無償・有償ソフトウェアに実装されている．

3. 教育・研修用への改造

3.1 知識データ範囲の限定

そもそもの「マテリアルキュレーション支援システム」は，俯瞰的に材料探索を行う目的で使用されるので，物性間関係性の知識データベースは，材料に関わる広範な分野を網羅して作成するように設計されている．しかし教育・研修用では，学ぶ対象となる分野に絞ったデータベースの方が目的に合致する．そこで，元となる知識データベースを，ある程度分野ごとに分類し（Fig.4 参照），分野ごとに物性関係性のデータベースのサブセットとして作成しておく．Fig.1 に示したようなネットワーク構造は，数学のグラフ理論の分野では「グラフ」と呼ばれ，種々の取り扱い方法がグラフ理論の中で確立している．この形のデータベースの利点として，分野ごとに作成した物性関係性のデータ（グラフ）に対し，任意に和や差を取ったデータ（グラフ）が作成できることがある．例えば，Fig.5 に示すように，グループ①とグループ②のグラフを足し算すると，新たな足し算されたグラフが作成される．その際，グル

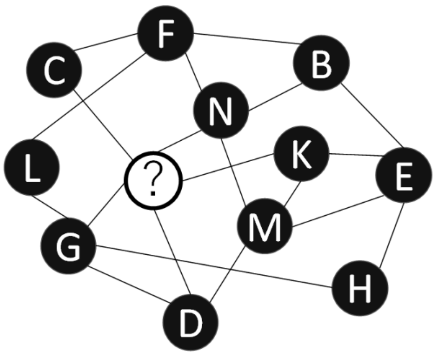


Fig. 6. An example of making a blank on a material property for education or training.

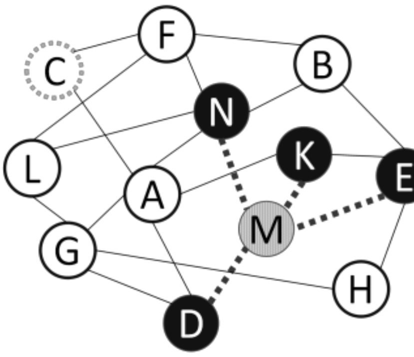
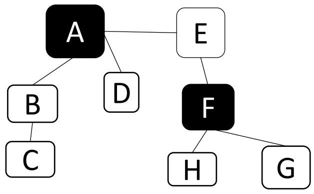


Fig. 7. An example of making a quiz on selecting proper connections among properties with M (shown as broken lines).

(a)

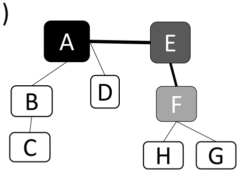


(b)

A	3
B	2
C	1
D	1
E	2
F	3
G	1
H	1

Fig. 8. An example of intentional missing node (property) formation based on graph theory.

(a)



(b)

	A	B	C	D	E	F	G	H	counts
A		0	B	0	0	E	E,F	E,F	14
B			0	A	A	A,E	A,E,F	A,E,F	6
C				A,B	A,B	A,B,E	A,B,E,F	A,B,E,F	0
D					A	A,E	A,E,F	A,E,F	0
E						0	F	F	12
F							0	0	11
G								F	0
H									0

Fig. 9. An example of intentional missing edge (connection) formation based on graph theory.

ープ①に存在していた物性とグループ②に存在していた物性が重なっていたら，同一のものとして扱われ，繋がりも足し算されたものになる．これにより，ユーザーのニーズに応じて探索対象となるデータベースの範囲を任意に設定できる．なお，元データベース内に，各繋がり（エッジ）の関係性が記述されている教科書の名前が入力されているので，特定の教科書から抽出された物性間関係性を除外するというような操作も可能である．

3.2 繋がりデータの意図的改変

教育・研修用データベース中の物性間関係性の内，特に注意を喚起したい，習得させたい関係性がある場合，その箇所を意図的に空欄などに置き換え，穴埋め問題として空欄を埋めさせる，という改変をデータベースに加える．データベースを改変して空欄を設ける方法には，大きく分けて２つある．一つは，物性の名称を空欄にする方法（Fig.6）で，もう一つは，関係性のデータ（エッジ）を削除して，実際には存在しているはずのエッジがどれかを答えさせるもの（Fig.7）である．

どの物性名（ノード）を空欄にするか，どの繋がり（エッジ）を選択対象にするかは，それぞれの教育・研究目的に応じて教育・研修担当者が行うのが一般的かと思われる．

他の方法として，多くのエッジが集まっている物性名や，繋がりを一つ削除すると全体の関係性が激変するようなエッジなど，グラフ理論のアルゴリズムに基づいて空欄にするノードやエッジを選択する方法もある．グラフ理論において，繋がりの分析を行うことを「ネットワーク分析」と呼び，多くのエッジが集まっている物性名は，次数中心性（＝各ノードから出ているエッジの数）を調べればよい．Fig. 8 は，Fig. 1 に示した繋がりの物性名を記号に置き換えて(a)，各ノードから出ているエッジの数をカウントした(b)もので，次数の高い A と F が空欄にする候補となる．繋がりを一つ削除すると全体の関

係性が激変するようなエッジは，ネットワーク分析において媒介中心性を調べればよく，Fig. 8 と同様に Fig. 1 に示した繋がりの物性名を記号に置き換え（Fig. 9(a)），2 つのノード間の最短経路上にあるノードに 1 を計上して，2 つのノードを全てのノードの組み合わせについて合計するというものである．例えば，A-B の最短経路上には A,B の他にはノードが無いので 0，A-C 間の最短経路上にはノード B があるので B，というような計上を，すべてのノードの組み合わせについて行う (Fig. 9(b)，組み合わせなので二重になって不必要な部分は黒塗りになっている）．その数え上げた表中にそれぞれのノードがいくつ出現するか，例えば A なら 14 個，B なら 6 個，というように数え挙げる．その結果は Fig. 9(b)の右側に counts として示してあり，この値が媒介中心性である．なお，このシンプルな例ではどの 2 つのノードの間をとっても最短経路が一つしかないが，最短経路が n 個ある場合には，1 ではなく 1/n を計上する（例えば，表の値を 1/2B のようにする）．Fig. 9(b)の counts の値からわかるように，A，E，F の順で媒介中心性が高く，A-E 間のエッジが最も「繋がりを一つ削除すると全体の関係性が激変するようなエッジ」であることが分かる．そこで，A-E エッジを削除して，本来繋がりのない C-D，D-H，と A-E を破線で繋ぎ，この 3 つの破線の内実線にすべき（繋がりがある）エッジはどれかを答えさせるという問題を作成することができる．

3.3 計測方法への拡張

元となる物性間関係図のデータベース及びその探索システムの次なる構想としては，既に，物性の値を測定するための物性測定法と各物性との関係性をデータベース化して物性間の関係性とリンクするという拡張が考えられている（Fig. 10）[9]．物性測定法自体のデータベースは各測定法のリストのようなもので，物性関係性データベースとは異なり測定法間の関係性は含有しない設計とした．このように物性間の関係性データベースと測定法のデータベースを独立させて，２つのデータベースの間に測定法データベースから物性へとリンクを張ることにより，各データベースの更新に適した構造としている．物性とその測定とのリンク部分に注目して具体例を挙げれば，「バンドギャップ」という物性値は，①「可視・紫外光吸収スペクトル法」という測定法を用いて，その吸収端の値から求めたり，②「電流 - 電圧特性測定（I-V 測定)」という測定法を用いて，その I-V 曲線の形状から求めたりできることが分かるようなシステムである（Fig. 11）．

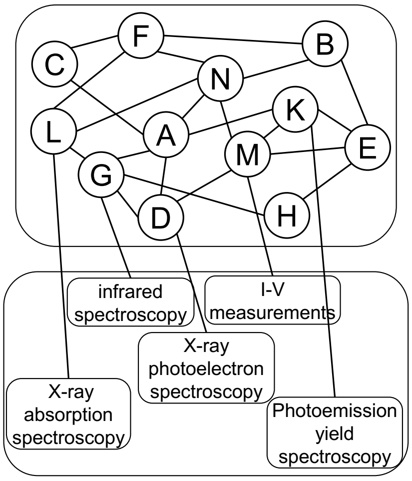


Fig. 10. Database of measurement methods having connections with material properties whose values can be obtained by corresponding measurements.

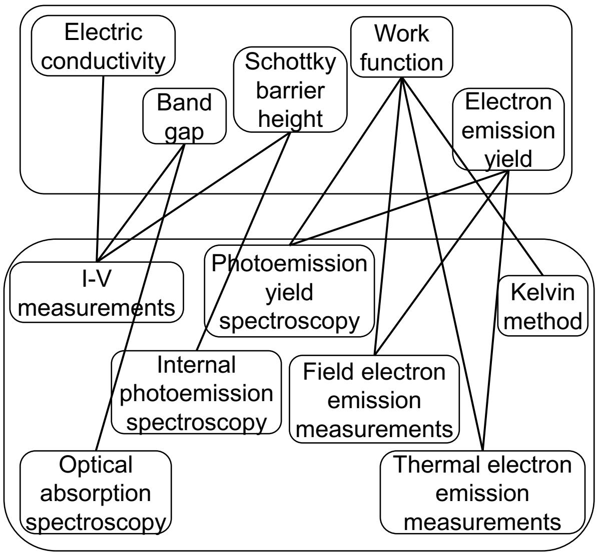


Fig. 11. Examples of connections between measurement methods and material properties whose values can be obtained by corresponding measurements.

また，互いに関連する物性の値とそれらの測定法を関連付けた例を Fig.12 に示した．固体中の電子の内殻レベルやフェルミレベル，価電子帯・伝導帯やバンドギャップと，X 線光電子分光法 (XPS）・X 線吸収分光法・X 線発光分光法の測定により得られる値との間には Fig. 12(a)のような関係がある．これを用いて物性間関係性と各種測定法のリンクを表現すると，Fig. 12(b)のようになる．Conduction band offset, Z は半導体材料においてショットキーバリア高さを決める重要な物理量であるが，X 線吸収分光

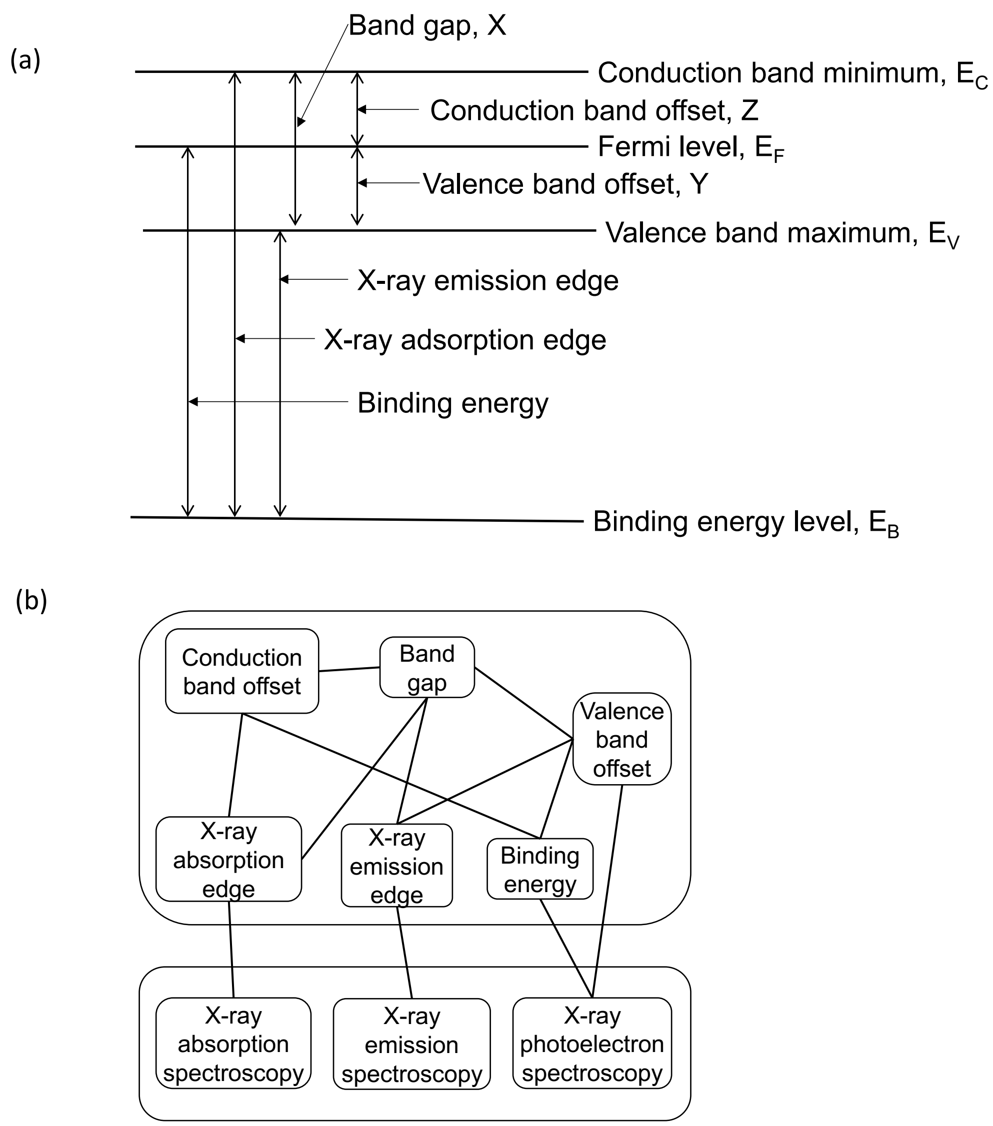


Fig. 12. (a) Relations among various energy levels. (b) Connections between properties and measurement methods relating to (a).

法による内殻レベルの吸収端の位置と XPS による内殻結合エネルギーの差から求めることができることが分かる．

4. 最後に

各種物性量の間の関係性をネットワーク型データベースとして蓄積し物性間の関係性を探索するシステムを，教育・研修用に用いるために機能を追加する構想と，物性間の関係性データベースと物性を測定するための計測方法のデータベースとリンクさせて利用する構想について報告した．

既に開発しているプロトタイプに教育・研修用の拡張を実装するためには，物性名のノードや物性間の繋がり（エッジ）の中から適切な部分を空欄にするための実装や，回答を入力させて正誤を判断するアルゴリズムの実装が必要である．一方で，物性間の関係性のデータベース本体はある程度絞った分野についてのデータで十分と考えられるので，読み込ませる教科書類を変更するのみで既存のシステムを用いることができると考えられる．一方，物性を測定するための計測方法とのリンクについては，計測方法のデータベース自体を作成する必要があり，これは物性間の関係性のデータベース作成に用いた自然言語処理技術をそのまま適用することはできないので，実装に向けてのさらなる技術開発が必要である．

5. 文献

[1] 吉武道子，*機能材料* **33**，48 (2013).
[2] 吉武道子，桑島功，柳生進二郎，知京豊裕，*表*

面と真空 **61**, 200 (2018).
[3] 吉武道子，佐藤文孝，矢野貴之，河野洋行，萩原稔，応用物理学会 2019 年 3 月.
[4] 吉武道子，佐藤文孝，河野洋行，*J. Surf. Anal.* **27**, 22 (2020).
[5] FUNDAMENTALS OF ELECTROCHEMISTRY 2nd edition, by V. S. BAGOTSKY, A JOHN WILEY & SONS, INC., 2006.
[6] 吉武道子：応用物理学会 2020 年 3 月
[7] 吉武道子, *J. Comput. Chem. Jpn.* **19**, 36 (2020).
[8] B. Korte, J. Vygen, *Combinatorial Optimization, Theory and Algorithms*, Springer, 2008. eBook ISBN: 978-3-540-71844-4
[9] 「探索システムおよび探索方法」特願 2019-026191

査読コメント，質疑応答
査読者 1. 鈴木昇（宇都宮大学）

この報告は，マテリアルキュレーション支援システムの教育・研修法，および当該システムと計測法とのリンクによる利便性の拡張を記載したものであり，本学術誌に適していると考える．なお，以下の点について修正等を検討されたい．

[査読者 1-1]
タイトルをご検討下さい.「と」が連続しています.

[著者]
丁寧に読んで細かな表現も直していただいてありがとうございました.
「マテリアルキュレーション®支援システムの教育・研修用展開および計測法とのリンク拡張」と修正しました.

[査読者 1-2]
2.2 節「A－B 間の繋がりのどこかに，ある物性 Z が含まれているかどうか（物性 Z が A と B の両方の物性に影響を与えるか）を探索することも可能である．」：どのように探索すれば良いのでしょうか. 図中に Z が記載されておりません.

[著者]
一般論化しすぎたようです.「Z」ではなく図中に含まれる「H」とし，どのように探索するかを記述しました.

[査読者 1-3]
3.1 節「なお，元データベース内に，各繋がり（エッジ）に対してその関係性が記述されている教科書の情報が入力されているので，同一グループ内の特定の教科書Xから抽出された物性間関係性を除外するというような操作も可能である．」：この文章が理解しづらいです．修正をご検討下さい.

[著者]
以下のように修正しました.「なお，元データベース内に，各繋がり（エッジ）の関係性が記述されている教科書の名前が入力されているので，特定の教科書から抽出された物性間関係性を除外するというような操作も可能である.」

[査読者 1-4]

3.2 節 「2 つのノード間の最短経路上にあるノードに 1 を計上して，2 つのノードを全てのノードの組み合わせについて合計するというものである.」: これが理解できません. 説明を加えて下さい. また，図 9 の counts がどのように求められるのかを説明して下さい.

[著者]

ご指摘ありがとうございます. 説明を加え，counts の求め方についても記述しました.

査読者 2. 眞田則明（アルバック・ファイ）

本記事は，著者らが開発したマテリアルキュレーション支援システムを教育・研修用に拡張の可能性とその具体性のある運用方法を記したものです．一人ですべての科学法則に精通するのが困難であるという著者の指摘は非常に同意できるものです．特に個人のレベルと知識に合わせた教育法を当てはめていく実務を考えた場合に，AI による支援が必要になることは大いに考えられます．また，表面分析に近い物性測定法を例にして知的好奇心を刺激する内容を述べてあり，JSA 誌の読者にぜひ紹介したい記事と考えます.

[査読者 2-1]　試験問題の作成

いくつかの質問をさせていただければと思います.

報道などで毎年のように，大学の入試問題で正答が 2 つ以上あったり正答がなかったりするケースが指摘されています．試験問題を作成する場合，自分の専門よりやや広く問題を作成しなければならないケースは普通ですから，その際に数多くの教科書を確認して知識範囲を確認したり，思いもよらない方向からの正・誤答を確認する作業は大変ですから，関係性の有無の発見と知識範囲の限定によるチェックが容易にできることはたいへんに便利な気がします．このような機能拡張は，試験問題のミス発見支援のような場合に機能することを想定できると考えてもよろしいでしょうか？

[著者]

興味深い適用課題を提供していただきありがとうございます.

はい，関係性についてのミスであれば発見支援にも機能するかと存じます．その場合，単純に知識範囲の限定機能を用いればよいと存じます．ここでは知識範囲の限定機能を教育・研修用として導入していますが，技術的には元のシステムにおいても知識範囲の限定機能を搭載でき（本稿では述べていませんが，拡張も可能で，しかも知識範囲をユーザーごとに設定できます），その形になるかと存じます.

[査読者 2-2]　計測誤差の発見

Fig. 12 は表面分析に携わる人間にもわかりやすい例になっています．バンドギャップ測定は，測定決定した方法によって，それぞれ別の誤差を含みます.（ご承知のように，エキシトンの局在とか電子や正孔の局在とか，本来の測定誤差の大きさとか）. 厳密にいえばどんな場合であっても，個々の物質の物理量は測定決定方法に依存します．３．３計測方法への拡張はたいへん重要と思いました. 前号の記事*の名越さんとのやり取りで,「物性値の測定方法との関連付けも構想の中には入っている」と記されていた点を早くも紹介いただき，大変興味深いのですが，「系統的な誤差の原因と別の物性との関係」や「誤差分布の大きさと測定法の関係」を発見することも目的に入るでしょうか？　また，これについても教育研修システムと関連させることはできるのでしょうか？

*吉武，佐藤，河野，*J. Surf. Anal.* **27**, 22(2020)

[著者]

計測誤差の原理が，計測方法に関する教科書の類に記載されていれば，それを抽出してくることは可能です．ただあくまでも原理で，計測される物理量が誤差原因となる物理量に影響される（＝関係している）という形で抽出されますので，システムが「系統的な誤差の原因と別の物性との関係」を直接示すことはありません．システムで用いている自然言語処理技術を別途，“計測法と誤差” に特化した形に改変してそのようなシステムを作成することは,「誤差の原因と別の物性との関係」に関して記述された信頼できる文書が数冊あれば，技術的には可能です.「誤差分布の大きさと測定法の関係」も同様に，それについて記述された信頼できる文書を数冊用意して，“計測法と誤差” に特化した形に改変したシステムを用いれば技術的には可能です．著者が開発中の一連のシステムは，科学原理のデータベースとその検索システムであり，解答を与えるソリューションシステムではありません（ソリューションを支援するシステム). ユーザーの知識範囲を超えた情報が必

要で，どの情報をどの情報源からどのように探せばよいかもわからない場合に，手っ取り早く基本情報を与え，より詳しくはどの情報源を読めばよいかを示唆するシステムです．また，教育用システムというシステムがあるわけではなく，人為的に関係性データに空欄を作る機能や知識範囲を限定する機能が搭載されているだけなので，これらの機能を物性関係性データベースと計測法データベースとのリンクに適用することは可能です．なお，ユーザーの課題と物性との間をつなぐユーザーインターフェースについても一連の構想の中には入っており特許出願もしておりますが，実装するにはユーザーの課題と物性との間を関係づける文言の入った大量の文書（コーパス）が必要で，その入手が最も大きな課題かと存じます.

[査読者 2-3]

技術報告ですので, Abstract には, 何らかの結論が必要と思います．データベースの拡張が「できた」のか構想が「できた」のかを明確にするなどの工夫をされる必要がないでしょうか.

[著者]

ご指摘ありがとうございます．このようなシステム開発の場合,（１）何を行うかの構想⇒（２）実現のためのアルゴリズム的な設計⇒（３）実装（プログラムのコードを書く）と段階が分かれると思いますが，本報告は（２）に当たりますので，それが分かるように修正しました．(２) は特許出願要件と同等です．((１) は特許化できない,（３）は著作権)．また，このご指摘を踏まえ，本文の「３．３　計測方法への拡張」に説明を加えました．なお，abstract はもう一人の査読者の方の「最後の文章がわかりにくい」とのご指摘も踏まえ，修正稿のように修正しました.