

# マテリアルズ・インテグレーションの ための材料情報の記述

Toshihiro Ashino  
Toyo University (東洋大学)  
ashino@acm.org

## ➤ 背景

- 材料データ交換を巡る状況
- マテリアルズ・ゲノム・イニシアティブ

## ➤ SIP革新的構造材料マテリアルズ・インテグレーション

## ➤ セマンティック・ウェブフレームワーク

## ➤ データ、数式、ルール

## ➤ まとめ

固体熱物性クラブ  
2016年2月5日  
秋葉原コンベンションホール

# 材料データ交換を巡る状況

- Fourth Paradigm - Data Intensive Scientific Discovery
  - Materials Genome Initiative - 新材料開発・材料評価の加速
- Electronic Data Interchange – 材料評価データの電子的交換
  - CEN WS/ELSSI-EMD(2009-2010), SERES(2012-2014) 機械試験データのフォーマット, FATEDA(2016-2017) 疲労試験データのフォーマット
- Open Data, Linked Open Data (LOD) – Web上での材料データの利用
  - G8, RDA, Data Publishing, Data Citation

# CEN/WS

ELSSI-EMD - Economics and Logistics of Standards-compliant Schemas and ontologies for Engineering Materials Data

SERES – Standards for Electronic Reporting in the Engineering Sector

ISO6892機械試験データフォーマット

FATEDA – FATigue TESt DAta

ISO120106疲労試験データフォーマット

Horizon 2020, INCEFA+ (軽水炉材料の疲労に関する評価)

# Open Data/Open Science

G8におけるOpen Data/Open Science – Research Data Alliance

学術出版会におけるData Publishing

Web上でのデータ利用Linked Data/Linked Open Data

データを公開することに対するインセンティブとしてのData Citation

データセットに対するIDの付与(doi, JaLC)

# Materials Genome Initiative

データ・シミュレーションの活用による材料開発の加速

Materials Genome Initiative  
for Global Competitiveness

June 2011



# 2つのアプローチ

## Materials Informatics

データ・サイエンス的アプローチ、大量の実験データを集めるのが困難なので電子バンド計算などをベースに組成から結晶構造・物性を推定

NIMSイノベーションハブ

## ICME

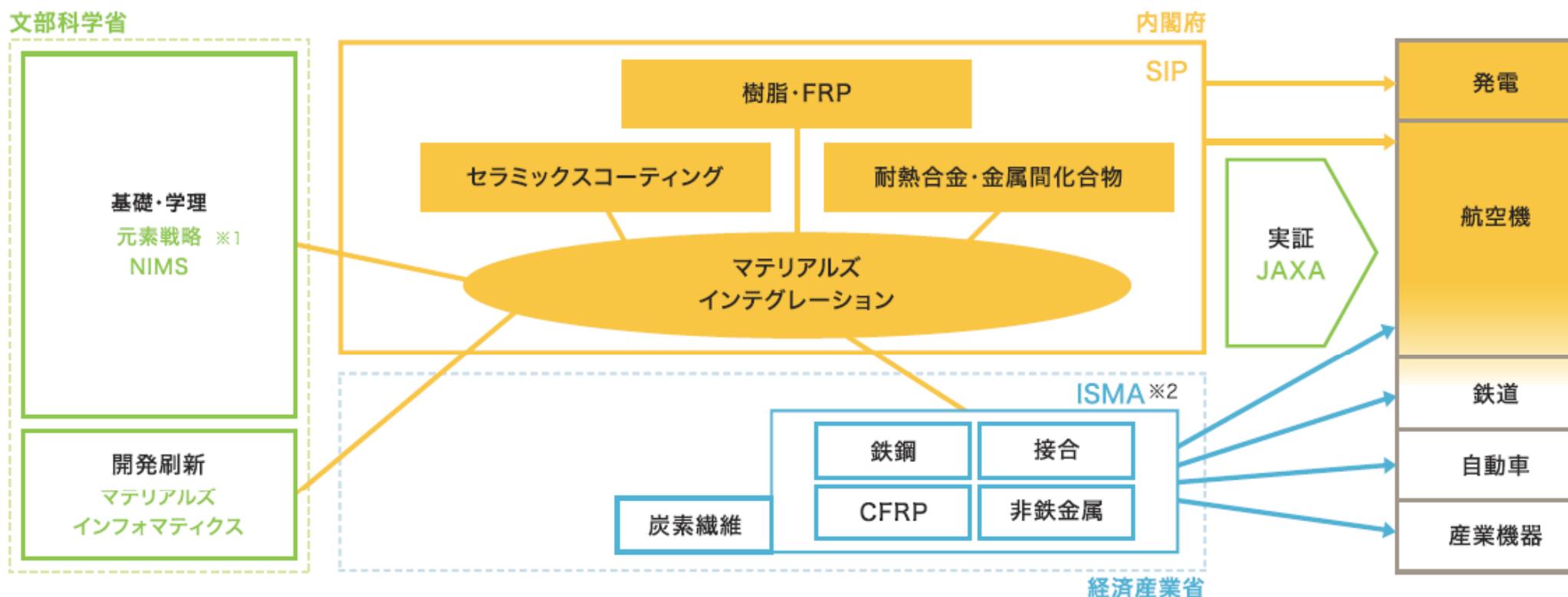
(Integrated Computational Materials Engineering)

熱力学計算、有限要素法などのシミュレーション手法を組み合わせて構造材料や鑄造のシミュレーションを行う

SIP革新的構造材料 Materials Integration

# 革新的構造材料の全体構想

JST革新的構造材料パンフレットより



※1 元素戦略プロジェクト(所管:文部科学省)

※2 新構造材料技術研究組合(Innovative Structural Materials Association)

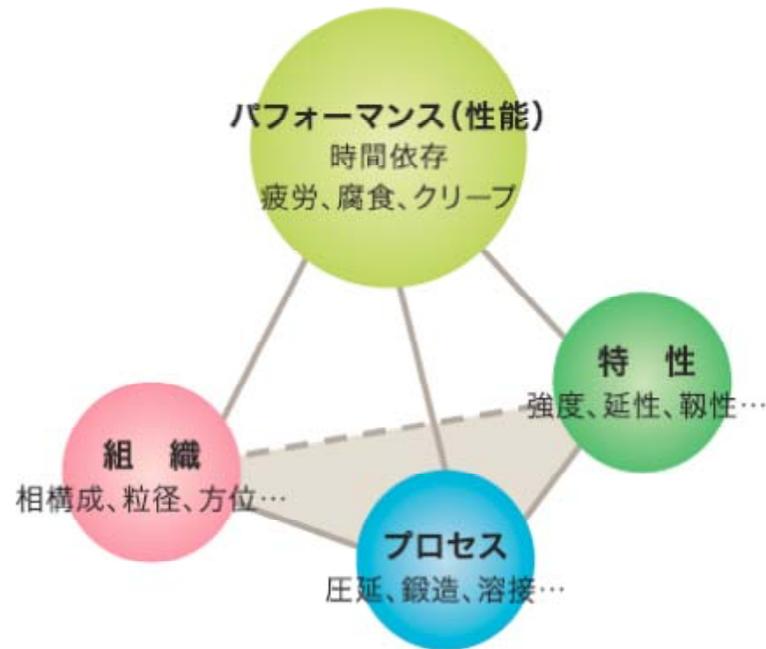
平成26年度NEDO委託事業(未来開拓研究プロジェクト、所管:経済産業省)

# マテリアルズ・インテグレーション

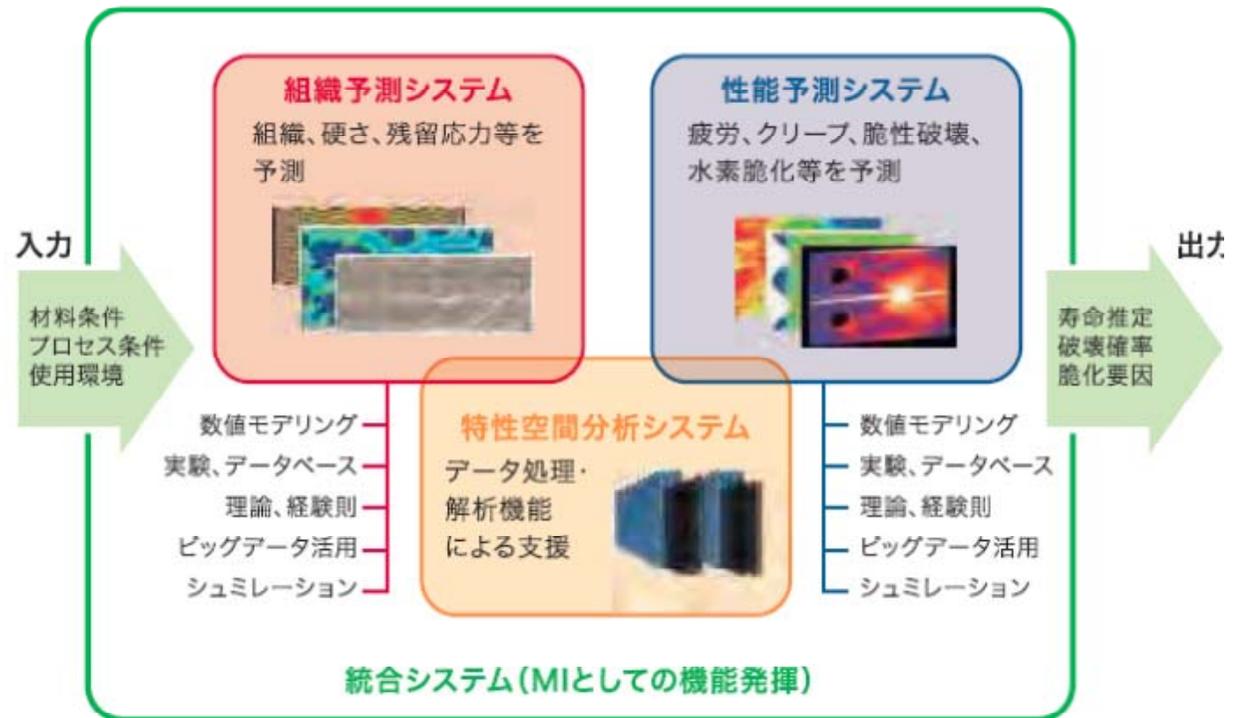
## JST革新的構造材料パンフレットより

MI;理論・実験・計算・データの融合

金属材料のMIシステム(高強度鋼の溶接継ぎ手性能を例題として先行実施)



未活用材料情報を取得して、構造材料の  
パフォーマンスや寿命を予測



全ての構造系材料へMIを展開

# データ・知識記述への要求

- 標準化されたデータフォーマット
- 標準化されたメタデータ辞書
- 永続的なID, URIによるアクセスの保証
- 計算機で処理可能な意味表現

# セマンティック・ウェブ技術

The Semantic Web Technology Stack  
(not a piece of cake...)

Most apps use only a subset of the stack

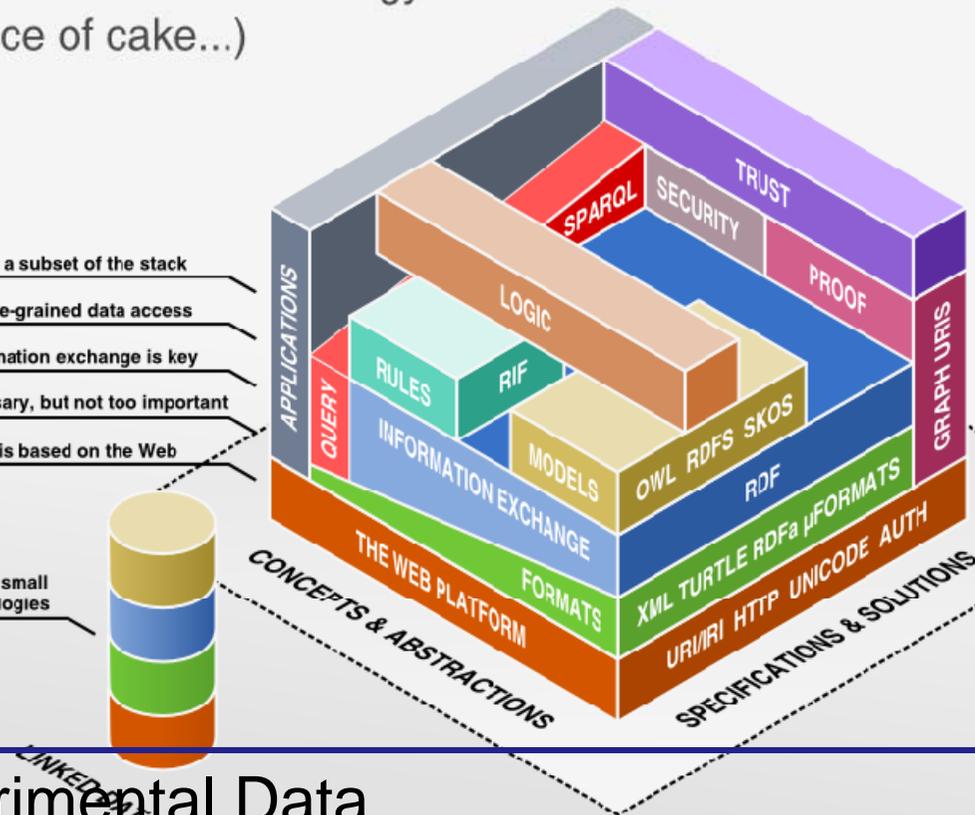
Querying allows fine-grained data access

Standardized information exchange is key

Formats are necessary, but not too important

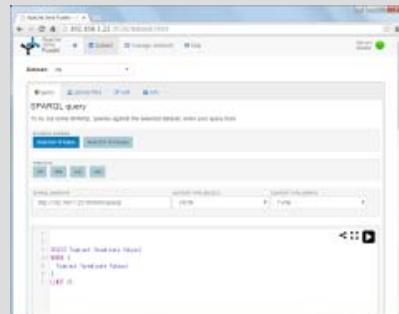
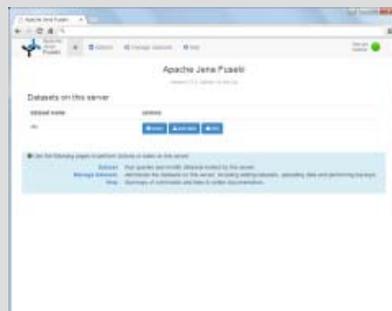
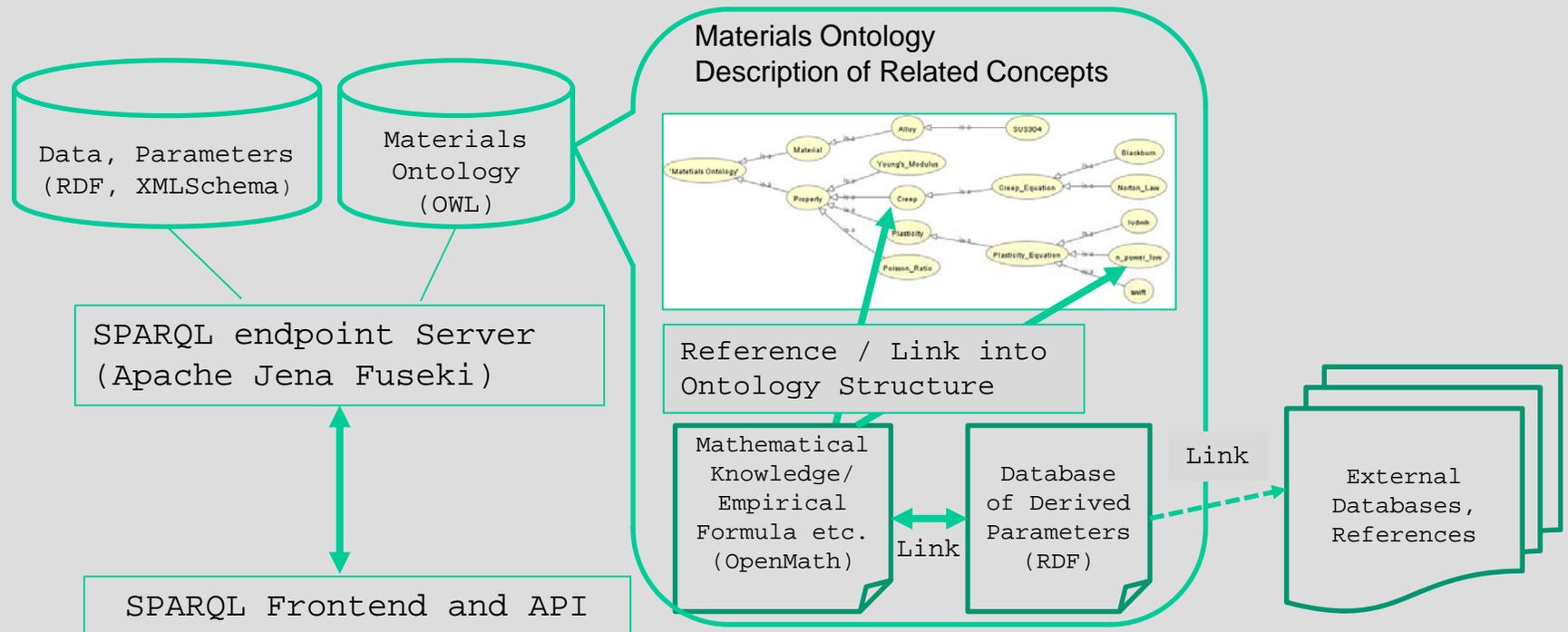
The Semantic Web is based on the Web

Linked Data uses a small  
selection of technologies



- XML Schema – Experimental Data
- RDF – Description about Data
- OWL – Relationships of Data
- (RIF) - Rules (planned)
- OpenMath – Semantic Representation of Equations
- SPARQL, XSLT, HDF, etc.

# セマンティック・ウェブ技術の MIへの適用



# 経験式・構成方程式ライブラリの構築

構造材料のマクロな性質の評価には経験則・実験式が不可欠

プレゼンテーション・マークアップ

– 数式の画面表示のためのマークアップ MathML

セマンティック・マークアップ

– 数式処理システムでの処理用 OpenMath

OpenMath standard

- ✓ Provides semantic representation and basic content dictionaries for mathematical relationships,
- ✓ Compatible with MathML3 semantic markup
- ✓ Developed library which convert OpenMath to MathML3 presentation markup.

# The Entry of Norton's Equation written in OpenMath/RDF

```
<rdf:RDF
  xmlns:rdf="http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#"
  xmlns:dc="http://purl.org/dc/elements/1.1/">
  <rdf:Description rdf:about="http://www.example.com/mat-ontology#Norton_Law">

  <dc:title>Creep Norton</dc:title>
  <dc:description>creep: norton</dc:description>
  <dc:subject>creep.norton</dc:subject>
  <dc:type>Creep_Equation</dc:type>

  <dc:relation>http://dx.doi.org/*****</dc:relation>

  <dc:relation xmlns=" http://www.openmath.org/OpenMath">
<OMOBJ>
<OMA cdbase="http://www.openmath.org/cd">
  <OMS cd="relation1" name="eq"/>
  <OMA>
  <OMS cd="calculus1" name="diff"/>
  <OMV name="epsilon"/>
  <OMV name="t"/>
  </OMA>
  <OMA>
  <OMS cd="arith1" name="times"/>
  <OMV name="A"/>
  <OMS cd="arith1" name="power"/>
  <OMV name="sigma"/>
  <OMV name="n"/>
```

Name and Description (RDF)

Links to Reference (RDF)

Semantic Markup of the Equation (OpenMath)

$$\dot{\epsilon}_c = A\sigma^n$$

# Entry of parameters for particular condition/material

```
<rdf:RDF
  xmlns:rdf="http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#"
  xmlns:dc="http://purl.org/dc/elements/1.1/">
  <rdf:Description rdf:about="http://www.example.com/mat-ontology#Norton_Law">

    <dc:title>creep.norton</dc:title>
    <dc:description>creep: norton: SUS304</dc:description>
    <dc:subject>creep.norton</dc:subject>
    <dc:type>Creep_Equation</dc:type>

    <dc:relation>http://www.example.com/mat-ontology#SUS304</dc:relation>
    <dc:relation>http://dx.doi.org/*****</dc:relation>

    <dc:relation xmlns="http://www.openmath.org/OpenMath">
      <OMOBJ>
        <OMA>
          <OMS cd="fns1" name="domain"/>
          <OMV name="A" />
          <OMF name="6.88587E-38" />
        </OMA>
        <OMA>
          <OMS cd="fns1" name="domain"/>
          <OMV name="n" />
          <OMF name="14.6356" />
        </OMA>
      </OMOBJ>
    </dc:relation>
  </rdf:Description>
</rdf:RDF>
```

Description of this Parameter Set (RDF)

Entity of "SUS304" defined in Materials Ontology

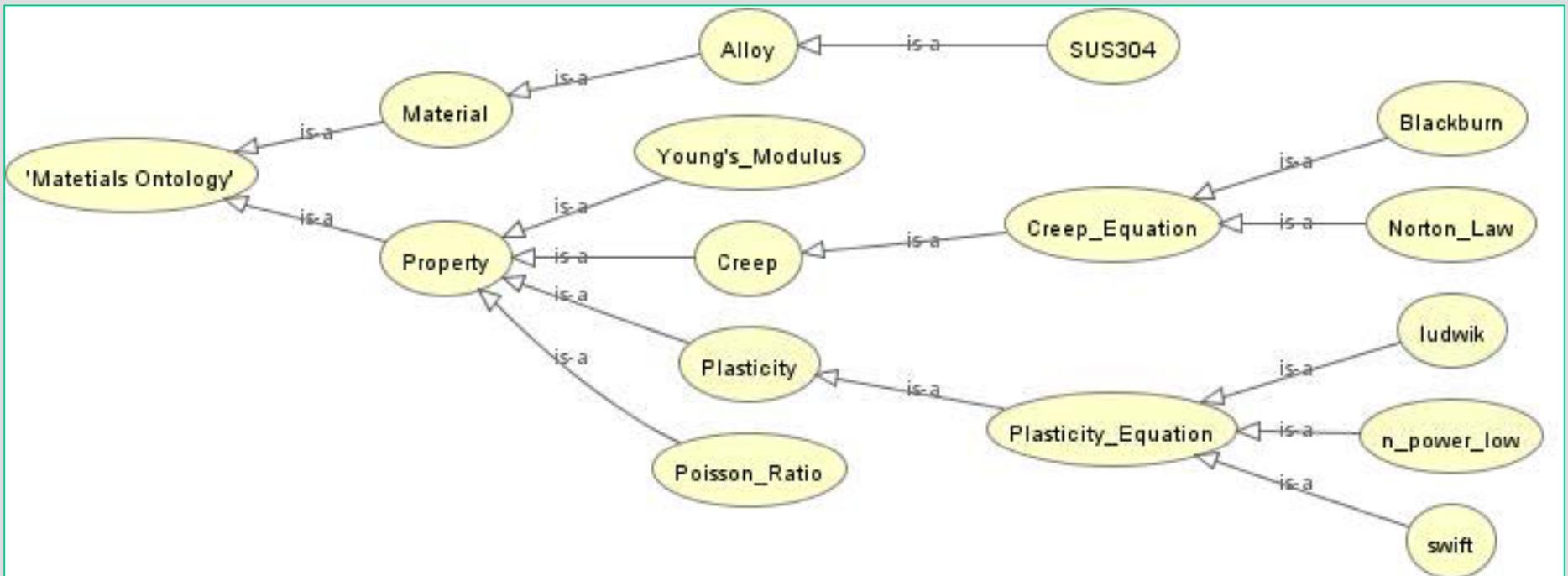
Set of Parameter Values for SUS304 (OpenMath)

# Materials Ontology

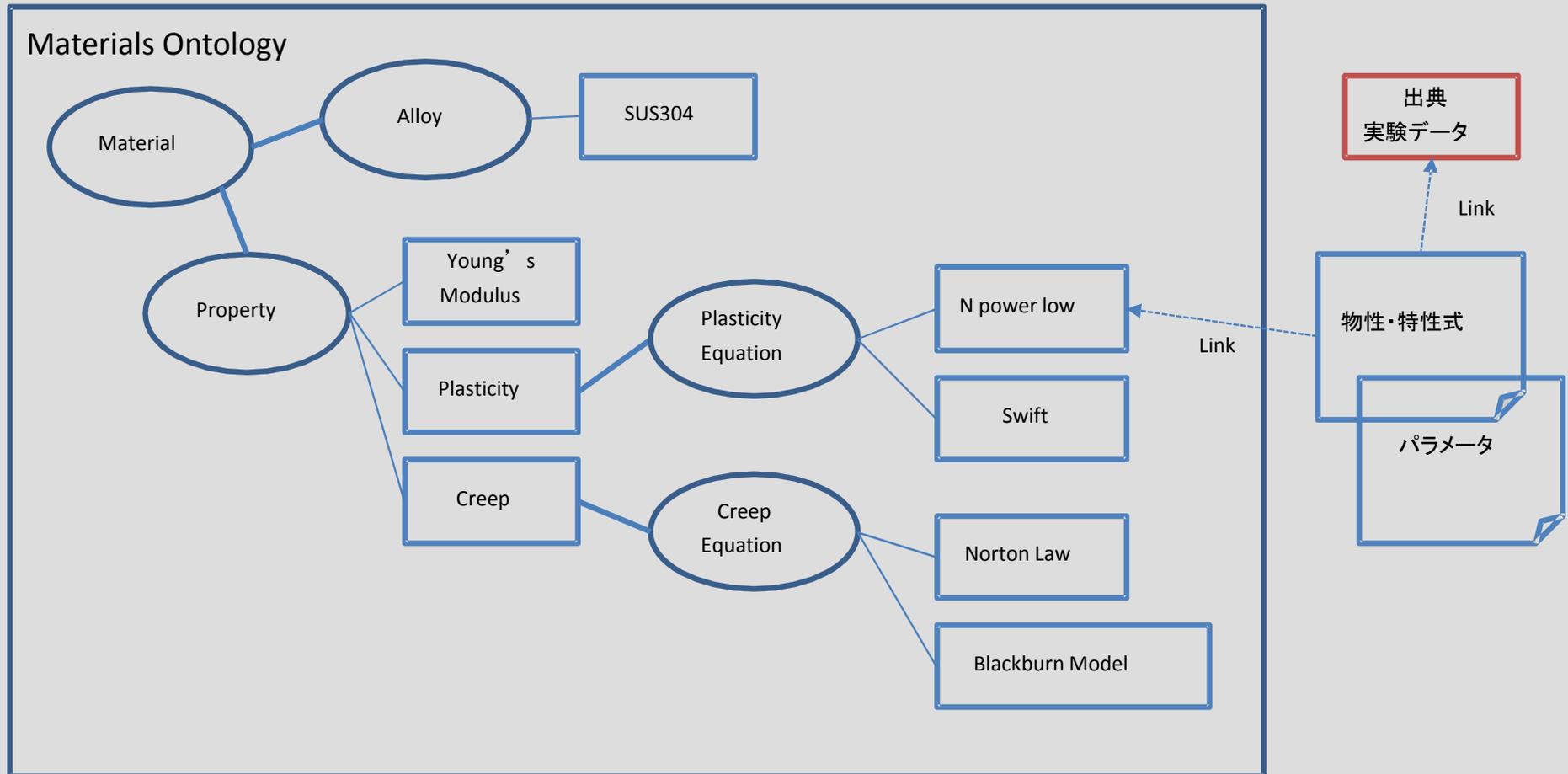
関連する概念とその関係を表した辞書

共通する語彙、その定義を記述

異なるリソースからでも、オントロジーの同じ定義を参照することで相互運用が可能



# 式に関する知識情報の記述



Material Ontologyのデータ構造(試作)

# 知識構造の記述

## 特性予測式の選択ルール

### 特性予測式の適用方法の記述形式

ルール記述言語RIF (Requirements  
Interchange Format)

<http://www.omg.org/spec/ReqIF/>

### 記述内容

適用方法のルール (材料、特性、特性式)

### 記述例 (特性式の適用ノウハウ)

#### 弾塑性

非線形塑性体・・・n乗硬化則、Ludwik型、Swift型

#### クリープ構成式

2次クリープ・・・Norton則

1次, 2次クリープ・・・Blackburnモデル

# データ・知識構造の検索 特性予測式の検索

## 記述方法

RDFクエリ言語SPARQL

<http://www.w3.org/TR/rdf-sparql-query/>

## 検索項目

材料、特性、特性式・パラメーター

Materials Ontologyの記述ファイル(RDF/XML)のタグと値  
をテキスト検索

材料、特性、特性式、特性式・パラメータ記述ファイルへのリンク情報

```
PREFIX rdf: <http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#>
PREFIX owl: <http://www.w3.org/2002/07/owl#>
PREFIX xsd: <http://www.w3.org/2001/XMLSchema#>
PREFIX rdfs: <http://www.w3.org/2000/01/rdf-schema#>
SELECT ?subject ?object
WHERE { ?subject rdfs:subClassOf ?object }
```

# まとめ

- オープンデータ、データパブリッシングなどが材料データにも関わりつつある
- データ中心科学の動きが材料分野にも波及しつつあるが、大量のデータを実験で取得することが難しく、数値計算や経験式などを連携するためのデータ設計が必要
- エンジニアリングの分野でも電子的な情報交換の観点からデータフォーマット規格策定の動きがある