

数千篇の論文の知識を1枚の図に整理するAIを開発

～プロセス・構造・特性の相関関係を自動的に抽出 効率的な材料設計を支援～

配布日時：平成30年9月25日14時

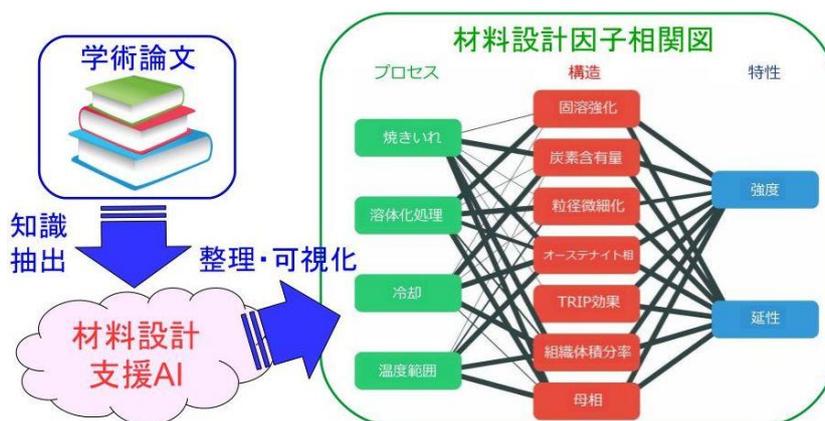
国立研究開発法人 物質・材料研究機構

概要

1. NIMS は豊田工業大学シカゴ校と共同で、科学技術論文から材料設計に必要なプロセス・構造・特性に関する因子とその相関関係を抽出し、整理・可視化するAIを開発しました。開発したAIを使って、数千篇の科学技術論文に収録された知識を1枚の図として整理することで、設計者の知識を補助し、合理的・効率的な材料設計が可能となります。

2. 材料の性能は複数の特性で決まり、それらの特性は構造およびその構造を制御するプロセスと関連しているため、望む性能の材料を設計するためには、対象とする特性と関連する構造やプロセスの因子とその相関関係を理解することで合理的・効率的に開発を進めることができます。現在研究が進んでいる情報科学のアプローチを物質・材料研究に利用するマテリアルズ・インフォマティクスでは、大量のデータがあれば、深層学習を利用して因子や相関関係を抽出することは可能です。しかし、実験による相当量の材料データの取得・データベース化には多くの労力がかかるため、プロセス・構造・特性・性能を関連づけた材料設計へのマテリアルズ・インフォマティクスの利用は困難でした。

3. 本研究チームでは、材料データではなく、科学技術論文の文章データを自然言語処理^{*1}によってコンピュータに読ませ、教師あり深層学習を適用することにより、材料設計に必要なプロセス・構造・特性に関する因子とその相関関係を抽出し、材料設計因子相関図を描画するアルゴリズムを開発しました。ユーザーが性能を規定するいくつかの特性を選ぶことで、抽出された知識を基に、特性と関連する構造、構造を制御可能なプロセスに関する因子とその相関関係を関連性の強さとともに図として表現します。例えば、鉄鋼材料に関して”強度”と”延性”を特性として選ぶことで、両特性の制御に有効であると知られている微細複合組織に関する構造・プロセス因子との相関関係が出力されます。



4. 本研究は、自然言語処理と深層学習を積極的に材料設計へ活用した先進的な取り組みであり、関連研究をさらに推し進めることができるよう、今回開発したAIのソースコードを無償で公開します^{*}。

※ソースコード公開のURL：https://bitbucket.org/0024takeshi/pspp_relation

5. 本研究は、物質・材料研究機構 構造材料研究拠点の渡邊育夢主任研究員、統合型材料開発・情報基盤部門の門平卓也グループリーダーと、豊田工業大学シカゴ校の大西健史 大学院生によって行われました。本研究成果は、Science and Technology of Advanced Materials 誌にて2018年9月19日に掲載されました。

研究の背景

材料の性能は用途に応じた複数の特性で決まり、材料の実用化のためには特性を発現するメカニズムの要因である構造およびその構造を制御するためのプロセスを関連付けて考える必要があります。このプロセス・構造・特性・性能の連関 (Process-Structure-Property-Performance reciprocity) を各因子とその相関関係として考える材料設計法が米国 Northwestern 大学 G.B. Olson 教授によって提案され、材料設計の効率化によって短時間で新材料を開発した事例が報告されています(図 1)。この考え方は米国で実施されているプロジェクト Materials Genome Initiative においても活用されています。

この材料設計アプローチでは、プロセスと特性という直接的に関連性のない因子を構造との連関を考えることで関係付けることができ、性能を最大化するために複数の特性を同時に制御できる構造因子に注目し、それを制御するためのプロセスを整理して検討することができます。

この材料設計アプローチの有用性は認められているものの、プロセス・構造・特性それぞれの設計因子とその相関関係を網羅して考えることは専門家であっても容易ではなく、この材料設計方法を活用するための障壁となっています。そこで、米国では材料設計をにやうための広範な知識を学ぶことができる学科が設立され、人材の育成に取り組むとともに、材料設計を支援するツールの開発が求められています。

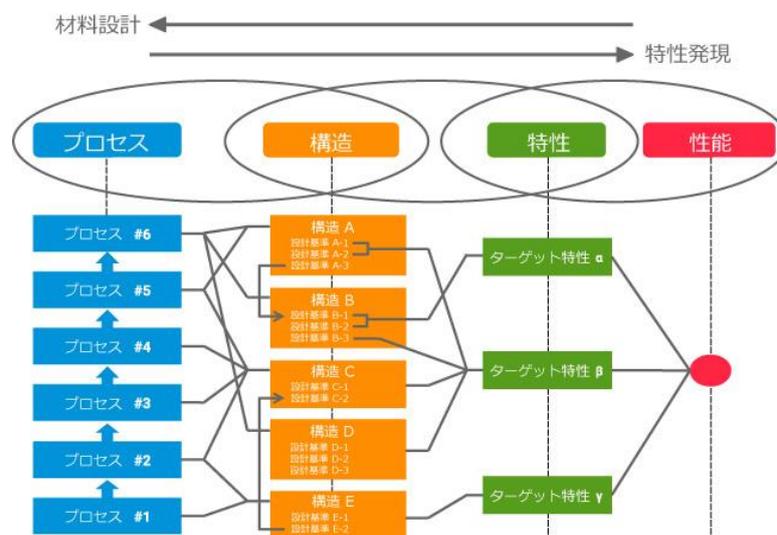


図 1 米国 G.B. Olson が提案した材料設計因子相関図。プロセス・材料組織・特性の連関をそれぞれの設計因子とその相関関係として整理する。

研究内容と成果

今回、NIMS と豊田工業大学シカゴ校の研究チームは、材料設計因子相関図の描画を支援する AI を開発しました。この AI では、人間が使用している言葉をコンピュータに理解させる自然言語処理と深層学習を組み合わせることで、大量の科学技術論文の文章データから専門知識を抽出し、目的とする材料とその特性に関する材料設計因子相関図を描画します。

マテリアルズ・インフォマティクスの研究では、深層学習を適用するための大量の材料データを用意することが容易でなく問題となりますが、本研究では、比較的容易に大量取得ができる科学技術論文の文章データを利用しました。開発した AI は、教師データとして与えたプロセス・材料組織・特性に分類した既知の設計因子とその相関関係を基に、文章データから同様の文脈で使用されている設計因子とその相関関係を新たに抽出します。また、相関関係において、科学技術論文中の個々の文脈から相関関係の強度を評価し、この強度を考慮した材料設計因子相関図を描画するアルゴリズムを開発しました。畳み込みニューラルネットワーク^{*2}を基とした開発アルゴリズムはロジスティック回帰モデルやサポートベクターマシンモデルと比較して、効率良く設計因子およびその相関関係を抽出することができます。

本研究では、開発した AI を Web アプリとして実装しました(図 2)。この Web アプリでは、出版社の提供するツールを用いて対象とする材料を検索ワードとして取得した 3,400 編程度の科学技術論文の文章データから、目的とする特性をいくつか指定することで、全体の材料設計因子相関図を描画できます。

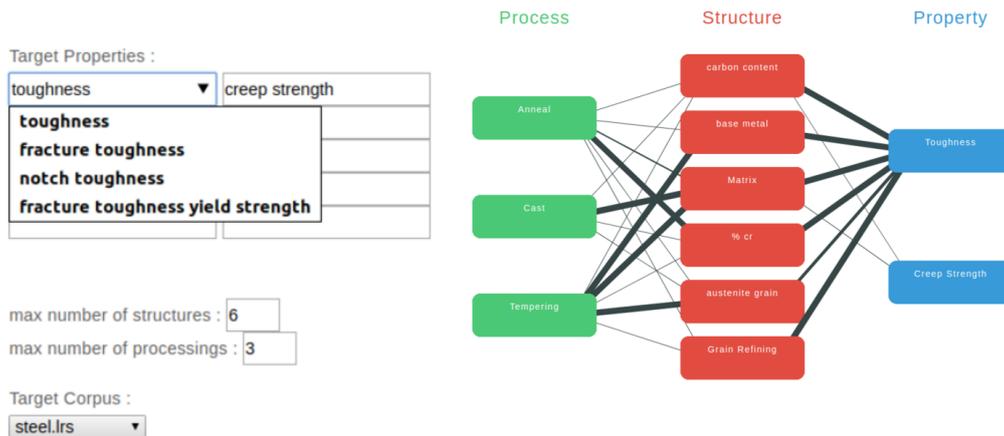


図 2 開発したデモシステム。目的とする特性，表示する材料組織とプロセスの設計因子の最大数，解析する文章データを指定し，材料設計因子相関図を描画する。設計因子間を結ぶ線の太さは関係性の強度を示している。

今後の展開

今後，開発技術で出力した材料設計因子相関図と数値シミュレーションを組み合わせることで，定量的な議論のできる材料設計支援技術の構築を目指します。また，本研究で開発した自然言語処理と深層学習を組み合わせた因子およびその相関関係を分析する技術は他分野にも応用可能であり，今後の関連研究の発展のために，開発した AI のソースコードを以下のサイトにて無償公開します。

https://bitbucket.org/0024takeshi/pspp_relation

掲載論文

題目：Relation extraction with weakly supervised learning based on process-structure-property-performance reciprocity

著者：Takeshi Onishi, Takuya Kadohira, and Ikumu Watanabe

雑誌：Science and Technology of Advanced Materials

掲載日時：2018年9月19日

DOI：10.1080/14686996.2018.1500852

用語解説

(1) 自然言語処理 (Natural Language Processing; NLP)

コンピュータを用いて，人間が日常的に使っている自然言語を処理させる一連の技術を指す。具体的には，辞書やルールに基づいて自然言語を最小単位の単語に分割する形態素解析，それにより得られた単語間の関係を解析する構文解析，およびその意味を解析する意味解析，さらに複数の文についてこれらの解析を行い文の関係性を解析する文脈解析などがある。

(2) 畳み込みニューラルネットワーク (Convolutional Neural Network; CNN)

ニューラルネットワークは，脳内にある神経回路網を人工ニューロンという数式的なモデルで表現したもので，シナプスの結合によりネットワークを形成した人工ニューロンが，学習によってシナプスの結合強度を変化させ，問題解決能力を持つようなモデル全般を指す。このうち CNN は，フィルタ内の領域の情報を畳み込んで作成する畳み込み層を導入したニューラルネットワークのことで，画像認識や自然言語学習の問題に広く適用されている。

本件に関するお問い合わせ先

(研究内容に関すること)

国立研究開発法人 物質・材料研究機構 構造材料研究拠点 解析・評価分野 高強度材料グループ

主任研究員 渡邊 育夢 (わたなべ いくむ)

E-mail: WATANABE.Ikumu@nims.go.jp

TEL: 029-859-2118

URL: <http://www.nims.go.jp/group/sdg/>

豊田工業大学シカゴ校

Ph.D. Student 大西健史 (おおにし たけし)

Email: tonishi@ttic.edu

URL: <http://0024takeshi.bitbucket.io>

(報道・広報に関すること)

国立研究開発法人 物質・材料研究機構 経営企画部門 広報室

〒305-0047 茨城県つくば市千現 1-2-1

TEL: 029-859-2026, FAX: 029-859-2017

E-mail: pressrelease@ml.nims.go.jp