



無機材料データベース「AtomWork-Adv」利用サービス（有償）開始 ～データ駆動型材料開発での利便性向上のため、データのダウンロードや検索機能等を充実～

配布日時：平成30年5月15日14時
国立研究開発法人 物質・材料研究機構

概要

1. 国立研究開発法人物質・材料研究機構（NIMS） 統合型材料開発・情報基盤部門 情報統合型物質・材料研究拠点 データプラットフォーム（プラットフォーム長：徐一斌）は、これまで非公開であった物質・材料データベース「AtomWork-Adv」（アトムワーク・アドバンスト）の一般向け有償利用サービスを、**5月28日（月）から開始**します。現在公開中のデータベース「AtomWork」と比べ、データ数や利用環境が大きく向上されることで、AI や機械学習を駆使したデータ駆動型の材料開発の促進が期待されます。



2. AI や機械学習の材料開発への応用が進む中、質の高い物質・材料データベースが求められています。現在 NIMS では、無機材料データベースとして、2002 年公開までの文献から収集した「AtomWork」を MatNavi（URL：<http://mits.nims.go.jp/index.html>）上で提供しています。ユーザ登録手続きのみで無償で利用できますが、データの更新は行っておらず、コピー・ダウンロード・検索等の機能も限定的なものでした。
3. 今回公開される無機材料データベース「AtomWork-Adv」には、2014 年までに公開された文献から収集した結晶構造データ（約 27.4 万件）、X 線回折データ（約 49.6 万件）、特性データ（約 29.8 万件）、状態図データ（約 4 万件）が収録されており、各データとも「AtomWork」の約 3～5 倍のデータが利用可能となります。さらに、多様な検索機能（元素・組成、結晶構造、特性カテゴリ）、2 元系材料の組合せデータ数を俯瞰できる材料マトリクス機能や、2 つの特性の組合せデータを自動的にプロットし各点の材料を表示する特性チャート機能など、ユーザフレンドリーな利用環境が整備されており、最近のデータ科学的手法の研究開発にも対応して、収録データのダウンロードも可能※となっています。（※ダウンロード数には制限があります）
4. 有償サービスの開始にともない、今後は、継続的に最新のデータの追加・更新を行います。2018 年度中には、2015 年～2016 年に文献から収集したデータの拡張・更新を行う予定です。
5. 本データベースの整備は、科学技術振興機構（JST）のイノベーションハブ構築支援事業「情報統合型物質・材料開発イニシアティブ（MPI）」の一環として行われました。

本件に関するお問い合わせ先

（「AtomWork-Adv」に関すること）
国立研究開発法人 物質・材料研究機構 統合型材料開発・情報基盤部門 情報統合型物質・材料研究拠点 データプラットフォーム（責任者＝プラットフォーム長：徐一斌）
ユーザ相談窓口（atomwork-adv@ml.nims.go.jp）

（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
TEL: 029-859-2026, FAX: 029-859-2017
E-mail: pressrelease@ml.nims.go.jp



背景

人工知能（AI）や機械学習といった言葉が注目され、物質・材料科学分野にもデータを活用したデータ駆動型手法が「第四の科学」と呼ばれ、導入されつつあります。JST イノベーションハブ構築支援事業「情報統合型物質・材料開発イニシアティブ（MI²I）」は、日本の物質・材料科学分野におけるデータ駆動型手法開拓のパイオニア的な位置付けとして、2015年7月に活動を開始しました。ここでは、データ、ツール、計算環境を一体化したMI²I データプラットフォームを構築し、この新手法を取り入れようとする産業界・学会等の皆様に試行的なご利用をさせていただいております。例えば、「AtomWork-Adv」やMatNavi「PolyInfo」データベースからAPIを経由して所望のデータセットを抽出して、機械学習ツール等と組合せて、データ駆動型の研究開発にご利用可能です。（NIMS 物質・材料データベースを活用したデータ駆動型ツール例「低分子化合物・高分子材料を対象とする分子設計ソフトウェア（iqspr）」：CRAN (MIT): <https://cran.r-project.org/web/packages/iqspr/index.html>、GitHub (MIT): <https://github.com/GLambard/inverse-molecular-design>) MI²I データプラットフォームのご利用には、申請・承認・登録プロセスが必要となります。MI²I コンソーシアム会員の募集ページをご参照ください：<https://mi-square.nims.go.jp/consortium/entry.html>

一方、広くデータベースを公開するサービスとしては、MatNavi から無機材料データベース「AtomWork」が無償でご利用できますが、データ駆動型手法での活用に必要なデータセットの抽出機能がなく、流行りの機械学習にデータベースを利用できませんでした。また、MatNavi 付加サービス（有償）として、例えば「AtomWork」物質一覧の提供等のサービスも実施しておりますが、機械学習への適用等の用途には対応しておりません。

今般、物質・材料の研究開発を担当され、データ駆動型手法を独自に適用しようとしている研究者・技術者に向け、必要データの抽出機能を付与し、データセット構築用の元データをダウンロード可能な「AtomWork-Adv」利用サービスを広く提供することといたしました。

「AtomWork-Adv」利用サービスの内容と既存データベース「AtomWork」の比較

	データ採取時期 (収集元データの文献発行年)	データ更新	公開方法 有償／無償 の別	外部からのアクセス
 Atom Work 主にブラウザでの閲覧のみ (コピー、ダウンロード制限有り)	1995-2002 状態図1.5万、 結晶構造8.2万、 特性5.5万、 X線回折:16.4万件	なし	インターネット 無料公開	約60万回/ 月
 Atom Work-Adv 高度な検索・表示機能、データのダウンロード機能を備える	1995-2002 2003-2014 状態図:4万、 結晶構造:27.4万、 特性:29.8万、 X線回折:49.6万件	2018年度内に2016年までに発行された文献から収集したデータを追加予定 それ以降も毎年更新予定	インターネット 有償公開	—

詳しくは、「AtomWork-Adv について」(下記 URL) をご参照願います。

日：<https://atomwork-adv.nims.go.jp/service.html>

英：<https://atomwork-adv.nims.go.jp/en/service.html>

「約款」

日： https://atomwork-adv.nims.go.jp/file/atomwork-adv_agreement_ja.pdf

英： https://atomwork-adv.nims.go.jp/en/file/atomwork-adv_agreement_en.pdf

● クライアントライセンス形態

ライセンス名	利用単位	エリア制限	認証方式		データのダウンロード	割引適用
			ID/パスワード	IPアドレス		
シングル	1ユーザ	なし	あり	-	可能 (**)	-
シングルIPアドレス	1ユーザ	あり(*)	あり	あり	可能 (**)	あり
法人IPアドレス	複数ユーザ	あり(*)	-	あり	不可	あり

(*) アクセス元のグローバルIPアドレスをご登録いただきます。
登録されたグローバルIPアドレスからのみ利用可能です。

(**) 年間ダウンロード回数は5,000回に制限されています。

● 年間利用料

ライセンス名	価格(税別)	支払い方式
シングル	150,000円	クレジット 銀行振込
シングルIPアドレス	(*1) 100,000円	クレジット 銀行振込
法人IPアドレス	(*2) 2,000,000円	銀行振込

(*1) 公共・アカデミア割引適用価格 50,000円(税抜)
公共・アカデミア割引適用価格 54,000円(税込) (*3)

(*2) 公共・アカデミア割引適用価格 1,000,000円(税抜)
公共・アカデミア割引適用価格 1,080,000円(税込) (*3)

(*3) 国内法に基づき、消費税等を加算します。

(*4) 本サービス提供の対価は、著作権の使用料には該当しないため、源泉徴収の対象では有りません。

今後の展開

これまでのサービス

- ・MatNavi「AtomWork」(無償、データセットの構築・ダウンロード機能無し)、
- ・MatNavi 付加サービス(「AtomWork」物質一覧等、有償、機能限定)、
- ・MI²I データプラットフォーム(MI²I コンソーシアム会員登録が必要。改善中ですが、利用可能な場所等に制約があります)

に加え、新たに無機材料データベース「AtomWork-Adv」(有償、データ駆動型研究開発に適用可能)の利用サービスを開始いたします。不定期ですが、継続的に最新のデータを取得し、反映・更新を進めてまいります。

・データセットの一括取得等、別途のサービスをご希望の皆様には、別途調整・相談をさせていただきます。ユーザ相談窓口(atomwork-adv@ml.nims.go.jp)へご一報ください。

本件に関するお問い合わせ先

(発表内容に関すること)

国立研究開発法人 物質・材料研究機構 統合型材料開発・情報基盤部門 情報統合型物質・材料研究拠点
データプラットフォーム (責任者=プラットフォーム長: 徐一斌)
ユーザ相談窓口 (atomwork-adv@ml.nims.go.jp)

(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

(補助事業に関する問い合わせ先)

国立研究開発法人 科学技術振興機構
イノベーション拠点推進部 COI グループ
E-mail: ihub@jst.go.jp
URL: <http://www.jst.go.jp/ihub/>