

材料科学知識グラフ：自動・自律実験の拡張ツール

Materials Science Knowledge Graph: A Tool for Extending Autonomous Experiments

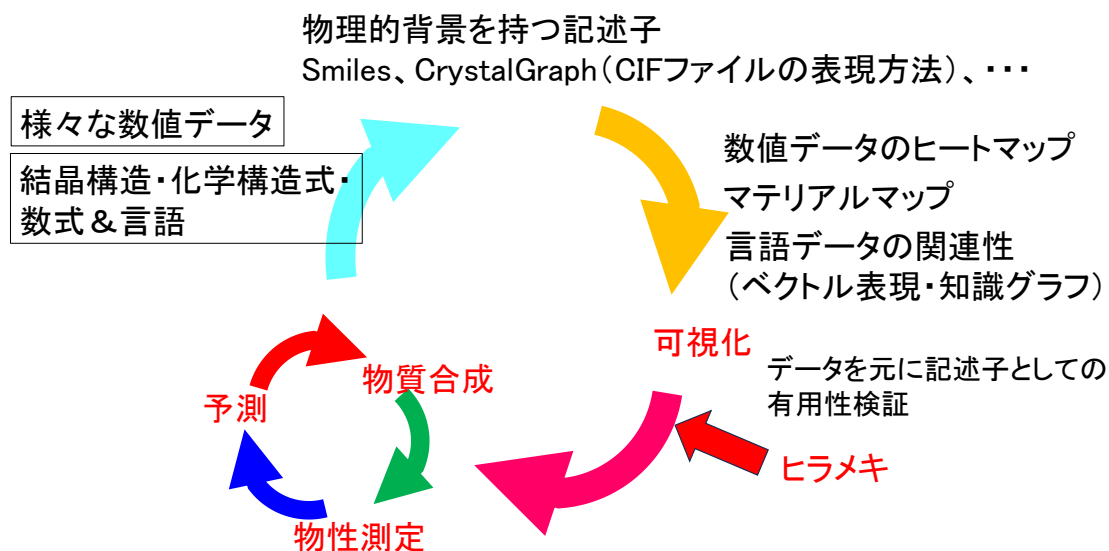
NIMS¹, MatQ-lab² °吉武 道子^{1,2}, 長田 貴弘¹

National Institute for Materials Science¹, Mat-Q-lab², °Michiko Yoshitake^{1,2}, Takahiro Nagata¹

E-mail: Yoshitake.miichiko@nims.go.jp

昨今、実験の自動化・自律化が盛んになり、限定条件下における材料組成やプロセスの最適化が高速に行えるようになってきている（下図の左下の小さなループ）。これを支えているのは実験データの機械学習であり、学習に用いられるデータの範囲内で非常に強力である一方、今までにデータがない領域における予測や仮説形成は得意ではない。それを補完するために、下図の右上の大きなループでは、計測やシミュレーションの数値データを直接フィードバックするのではなく、もう少し様々なデータ処理による可視化や、直接小さなループを回せないような知識情報などを取り入れて探索範囲を広げることが試みられる。

その中で知識グラフというのは、言語情報をもとに関連する知識をつないだもので、アナロジー思考の誘発などに役立つと考えられる。著者の一人は、物性間の関係性を知識グラフにして利用する「マテリアルキュレーション」を提唱し、富士通株式会社と共同でシステム実装を行った[1]。当時は LLM の出現前で関係性の抽出は構文解析を基盤としていたが、現在では LLM を用いた別種の材料知識グラフも他研究者によりいくつか作成されている[2, 3]。我々は今回、ChatGPT-4o を用いて物性間の関係性の知識グラフの作成を試みたので報告する。



[1] Yoshitake, M.; Sato, F.; Kawano, H. J. Surf. Anal. 2020, 27, 22–33.

[2] <https://arxiv.org/pdf/2404.03080>: Construction and Application of Materials Knowledge Graph in Multidisciplinary Materials Science via Large Language Model

[3] <https://arxiv.org/pdf/2411.08414>: Material Property Prediction with Element Attribute Knowledge Graphs and Multimodal Representation Learning