

マテリアル循環のための知識統合

Knowledge Integration for Material Circulation

NIMS ○石井真史, 須田康政, 坂本浩一

NIMS ○Masashi Ishii, Yasumasa Suda, Koichi Sakamoto

E-mail: ISHII.Masashi@nims.go.jp

【背景】物質・材料研究機構では、高分子データベース PoLyInfo を構築、公開してきた¹。現在 PoLyInfo は完全に機械可読化され、高分子オントロジー上で概念化されている²。作成したオントロジーは、国際的な基本オントロジー Basic Formal Ontology, BFO に準拠しており、外部のデータとの連携に優れている。

近年、プラスチックの環境負荷は深刻化しており、製造する側の社会的責任は増加している。情報科学を背景に、ここにはデータを提供する側の責任も含まれているであろう。我々は、PoLyInfo のデータ収集対象である高分子重合の前・後過程へのデータ連携を図ることにより、マテリアル循環のための知識統合を試みた。

【知識統合】 Fig. 1 に示すように、プラスチックの量を削減するバイオフィラー、高分子を分解する微生物、実際に低分子化・無機化を進める蛋白質・酵素・塩基配列、そして、高分子を再生する低分子の環境負荷・安全性情報を関連させ、材料開発のサステナビリティを確保する、知識基盤 (Knowledge Base, KB) を設計した。この KB の連携対象は以下のとおりである。

PoLyInfo: <https://polymer.nims.go.jp/>

AlgaeBase: <https://www.algaebase.org/>

NCBI: <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/>

DBRP: <https://www.nite.go.jp/nbrc/dbrp/top>

UniProt: <https://www.uniprot.org/>

NITE-CHRIP: https://www.chem-info.nite.go.jp/chem/chrip/chrip_search/systemTop

PubChem: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>

Nikkaji: <https://jglobal.jst.go.jp/info/nikkaji>

【実装】KB はポータル形式で提供され、ポータルから各データベースへのアクセスは、既に RDF (Resource Description Framework) 化されている PoLyInfo は認証付きエンドポイント、連携データベースの内、RDF 化されているものは、DBCLS の RDF ポータル (<https://rdfportal.org/>) のエンドポイント、RDF 化されていないものは、連携オントロジーを作成し NIMS の公開エンドポイントを通して実現した。当日は本 KB の実装結果を議論する。

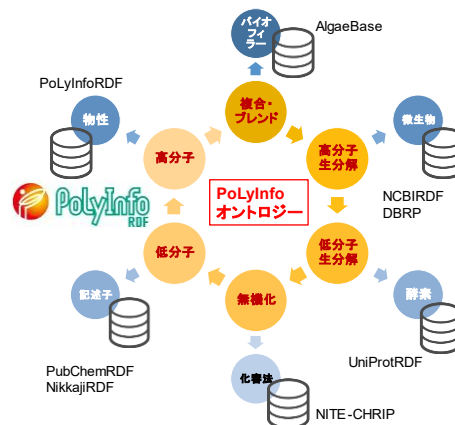


Fig. 1 マテリアル循環のための知識統合

【謝辞】データベース連携に、NITE の増田有紗先生、市川夏子先生のお力をいただくと共に、MEXT、DxMT 事業 (JPMXP1122714694) および SIP 「マテリアル事業化イノベーション・育成エコシステムの構築」の支援を頂きました。

【参考文献】

¹ M. Ishii et al., STAM Method, Vol. 4, 2354649

² M. Ishii et al., STAM Method, Vol. 4, 2354651