

材料情報統合化システム DIMNET の構築

Implementation of Integrated System for Distributed Materials Data "DIMNET"

1 K - 9

松原 雅信¹、西川 宜孝¹、二瓶 正俊²、坂本 正雄²¹ 株式会社 富士総合研究所 計算科学技術研究センター² 金属材料技術研究所 計算材料研究部

1. はじめに

物質・材料設計は、従来の経験的知見と計算予測とのハイブリッドな手法から、原子・分子レベルの材料設計へとそのスコープを拡大しており、計算材料設計技術が現実的な手法になりつつある。これまでに得られた経験的な知見や計算結果等の材料情報を、データベースとして整備し、これらの材料情報を統合化することにより、高精度な材料特性評価が可能となる。

一方、ネットワークを利用した情報提供サービスの本質は、情報資源の仮想的な共有化と考えられる。材料情報およびこれらを用いた材料特性評価技術を、ネットワークを介して仮想的に共有することにより、物質・材料設計技術の基礎、基盤技術を提供することが可能になる。日本の情報科学技術の発展には、このような研究環境の構築および提供が必要である。

著者らは、データベース等の種々の材料情報を利用して、高精度な材料強度特性の予測と評価を行うことを目的とし、ネットワーク上に分散している種々の材料情報を統合化し、材料強度特性を予測するための材料情報統合化システム DIMNET (Integrated System for Distributed Materials Data using Network) を構築しており、DIMNET の基本部および材料強度評価システム DIMS 等の複数の材料情報データベースを実装している [1]。本研究では、複数のデータベースへ透過的かつ統一的にアクセスするための機能を実装し、ネットワーク上に分散している種々の材料情報の統合化を目指すシステムを実現した。

2. DIMNET の概要

DIMNET は、ネットワーク上に分散している材料情報を統合化し、高精度な材料強度特性の予測と評価を行うためのシステムである。DIMNET で対象としている材料情報を以下に示す。

Masanobu Matsubara¹, Nobutaka Nishikawa¹Masatoshi Nihei², Masao Sakamoto²¹ Center for Computational Science and Engineering,

Fuji Research Institute Corporation

2-3 Kandanishiki-cho, Chiyoda-ku, Tokyo 101-8443

² National Research Institute for Metals

- 材料強度データ、熱物性データ等のファクト情報
- 解析結果等を数式化した数式情報
- 組織写真や破面写真等の画像情報
- 知識情報

各材料情報は個々にデータベースとしてネットワーク上に分散している。各材料情報データベースとのインターフェースとして WWW サーバを用いており、ユーザは、WWW ブラウザを用いて各材料情報データベースにアクセスし、材料情報の検索、整理、解析、評価等を行う。図 1 に、DIMNET の概念を示す。

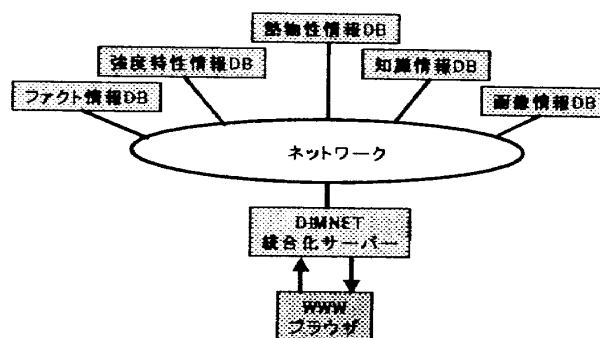


図 1 DIMNET の概念

分散している材料情報データベースのデータを共通インターフェース上で統合化することにより、高精度な材料特性評価が可能となる。ユーザ識別機能および各ユーザの検索結果の保存機能を備えており、不特定多数のユーザの利用が可能である。

3. DIMNET の構成

3. 1 DIMNET のシステム構成

DIMNET は、プラットフォームとして、WWW サーバ環境を利用しており、個々の材料情報データベースへのアクセス (検索、登録、更新、削除) を行う DIMNET 基本部、複数の材料情報データベースへの統一的なアクセス (検索) および検索結果の統合化を行う DIMNET 統合化サーバから構成される。図 2 に、DIMNET のシステム構成を示す。現在、材料情報データベースは、材料強度特性情報データベース DIMNET-DIMS、元素物性データベース、材料強度 (引張り強度) データベー

スが利用可能である。

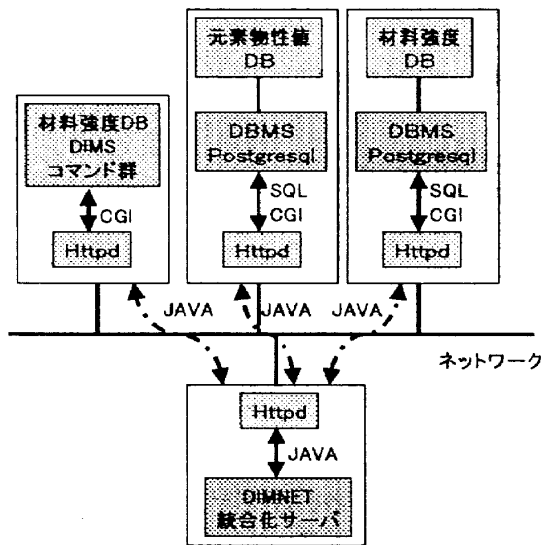


図2 DIMNET のシステム構成

3. 2 DIMNET 材料情報データベース

DIMNET 材料情報データベースは、DIMNET 基本部、WWWサーバ(httpd)、データベース・マネージメント・システム(Postgresql)から構成されている。DIMNET 基本部は、材料情報データベースにアクセスするためのインターフェースである。データベース・マネージメント・システムとして、Postgresql を採用しており、材料情報データベースへのアクセスをWWWサーバのCGI機能およびSQLを用いて実現している。DIMNET 基本部は、各材料情報データベースに対し、共通化しており、材料の選択、検索、追加、特性評価、評価結果の表示等の統一的操作が可能である。図3に、DIMNET 材料情報データベースの構成を示す。

金属材料技術研究所において研究開発された材料強度特性情報データベース DIMS は、検索、グラフ表示等を行うコマンド群から構成されており、これらのコマンド群をGUIによって操作する[2-4]。DIMNET-DIMSは、DIMSをネットワークを介して利用可能としたものであり、WWWサーバのCGI機能を用いてDIMSコマンドの実行および結果出力の表示を行っている。

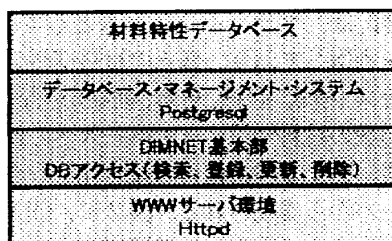


図3 DIMNET 材料情報データベースの構成

3. 3 DIMNET 統合化サーバ

DIMNET 統合化サーバは、DIMNET 材料情報データベースを統合化するものであり、材料情報がネットワーク上に分散していることを意識せずに、各材料情報データベースに対し透過的かつ統一的なアクセスを実現している。DIMNET 統合化サーバは、DIMNET 材料情報データベースへのナビゲーション、複数の材料特性データベースへの検索、検索結果の統合化機能をもつ。図4に DIMNET 統合化サーバの構成を示す。複数のネットワーク上に分散した材料データベースに対し、検索、および検索結果のマージおよび編集が可能である。

DIMNET 統合化サーバは、複数のWWWサーバ間のデータ転送を行うため、一部 JAVA 言語を用いて実装している。統合化サーバは、各材料情報データベースのDIMNET基本部におけるデータベース検索を実行する。統合化サーバが開いたストリームに各材料情報データベースが検索結果を出力することにより、統合化サーバ上に分散した複数のデータベースの検索結果を得ることを実現している。

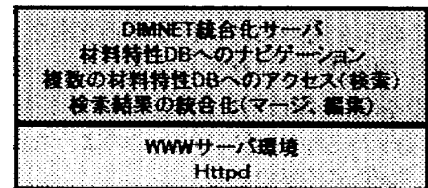


図4 DIMNET 統合化サーバの構成

4. おわりに

ネットワークを介して分散している種々の材料情報を統合化し、材料強度特性を予測するための材料情報統合化システム DIMNET を構築している。本研究では、DIMNET 統合化サーバを構築し、ネットワーク上に分散している種々の材料情報の統合化を実現した。今後は、他の材料情報データベースの構築・整備、材料情報の統合化による材料特性予測技術の研究開発を図るとともに、DIMNETをインターネット上で公開する予定である。

参考文献

- [1] 二瓶、坂本、西川、井、"WWWを用いた材料情報統合化システム DIMNET の構築", 情報処理学会第54回全国大会講演集, 1997
- [2] 二瓶、今野、"データベースを用いた疲労強度特性の予測 (第1報 高サイクル疲労強度の予測)", 日本機械学会論文集 (A編), Vol.58, No.552, 1992
- [3] 二瓶、今野、"データベースを用いた疲労強度特性の予測 (第2報 低サイクル疲労強度の予測)", 日本機械学会論文集 (A編), Vol.59, No.561, 1993
- [4] 二瓶、今野、"データベースを用いた疲労強度特性の予測 (第3報 S-N曲線の予測)", 日本機械学会論文集 (A編), Vol.60, No.576, 1994