

博士論文

新規複合材料の開発に向けた複合可能な
知識・材料の組み合わせの予測に関する研究

石井 智夏

(藤末)

目次

要旨	9
1. 序章.....	12
1.1. 本研究の背景	12
1.1.1. 知識の急増に伴う知識の細分化.....	12
1.1.2. 知識の複合による新規知識の創出	14
1.1.3. 複合材料の重要性.....	16
1.1.4. 複合材料の開発における課題.....	17
1.2. 本研究の目的	18
1.3. 本論文の構成	18
2. 先行研究	20
2.1. 先行研究.....	20
2.1.1. 複合可能な材料と用途の組み合わせの予測.....	20
2.1.2. 複合可能な材料と材料の組み合わせの予測.....	20
2.2. 先行研究を踏まえた本研究の位置付け	21
3. 複合可能な材料と用途の組み合わせの予測.....	22
3.1. 先行研究.....	22
3.1.1. 研究活動の俯瞰: 論文の引用関係ネットワークの利用	23
3.1.2. 商業活動の俯瞰: クラスタ間の類似度の利用	24
3.1.3. 政策活動の俯瞰: マトリクスの利用	25
3.2. 提案手法.....	26
3.2.1. 提案手法の目的	26
3.2.2. 提案手法の概要	27
3.2.3. 分析対象分野に関する論文の抽出	27
3.2.4. 論文の引用ネットワークの作成とクラスタリング	28
3.2.5. クラスタの特徴語算出	29
3.2.6. 知識領域間の関与性分析	29
3.2.7. 知識領域の成熟度算出	30

3.2.8.	各国の研究活動方針の比較	31
3.3.	結果	32
3.3.1.	分析対象分野の選択	32
3.3.2.	FET	33
3.3.2.1.	分析対象分野の概要	33
3.3.2.2.	知識領域の抽出とラベリング	33
3.3.2.3.	知識領域の成熟度算出	36
3.3.2.4.	知識領域間の関与性分析	39
3.3.2.5.	各国の研究活動方針比較	40
3.3.3.	EDLC	46
3.3.3.1.	分析対象分野の概要	46
3.3.3.2.	知識領域の抽出とラベリング	46
3.3.3.3.	知識領域の成熟度算出	50
3.3.3.4.	知識領域間の関与性分析	53
3.3.3.5.	各国の研究活動方針比較	54
3.3.4.	光触媒	59
3.3.4.1.	分析対象分野の概要	59
3.3.4.2.	知識領域の抽出とラベリング	59
3.3.4.3.	知識領域の成熟度算出	62
3.3.4.4.	知識領域間の関与性分析	65
3.3.4.5.	各国の研究活動方針比較	67
3.4.	考察	72
3.4.1.	複合可能な知識領域の組み合わせの予測	72
3.4.2.	日本のイノベーション創出の促進に向けた課題	73
3.5.	本章のまとめ	77
4.	複合可能な材料と材料の組み合わせの予測	79
4.1.	先行研究	79
4.1.1.	材料分野×情報処理技術	79
4.1.2.	材料分野×ネットワーク科学	81
4.1.3.	他分野×リンク予測	81

4.2.	提案手法.....	83
4.2.1.	提案手法の目的	83
4.2.2.	提案手法の概要	84
4.2.3.	複合材料に関する論文の抽出.....	85
4.2.4.	材料単語の抽出	85
4.2.5.	材料単語の共起ネットワークの作成.....	86
4.2.6.	リンク予測.....	86
4.3.	結果.....	92
4.3.1.	複合論文に関する論文の抽出.....	92
4.3.2.	材料単語の抽出	92
4.3.3.	材料単語の共起ネットワーク作成	95
4.3.4.	リンク予測.....	100
4.3.5.	リンク予測の結果の精査.....	102
4.3.6.	国際比較	104
4.4.	考察.....	106
4.4.1.	材料単語の抽出	106
4.4.2.	材料単語の共起ネットワーク作成	107
4.4.3.	リンク予測.....	109
4.4.4.	リンク予測の結果の精査.....	110
4.4.5.	国際比較	112
4.5.	本章のまとめ	114
5.	考察.....	115
5.1.	政策形成や施策の運用に対する貢献.....	115
5.2.	技術の商業化に対する貢献.....	116
5.3.	研究計画の考案に対する貢献.....	116
6.	終章.....	117
	付録 A: 3.3 において省略したデータ	120
	付録 B: 4.3 において省略したデータ	146

参考文献.....	151
研究業績.....	171
謝辞.....	172

目次

図 3.1 引用ネットワークのクラスタリング	29
図 3.2 提案手法で定義するマトリクス	31
図 3.3 各知識領域の論文数と平均出版年の関係	37
図 3.4 各知識領域の論文数と平均出版年の関係	51
図 3.5 各知識領域の論文数と平均出版年の関係	63
図 3.6 「雁行型」・「平行型」・「独立型」のイメージ	75
図 4.1 複合可能な材料の予測の手順	85
図 4.2 ネットワークの例	87
図 4.3 リンク予測の手順	91
図 4.4 感度・特異度・平均精度の定義	91
図 4.5 ROC 曲線、AUC の例	92
図 4.6 1 論文あたりの 100 材料単語間共起平均回数の時系列変化	96
図 4.7 材料単語の出現論文数と共起材料単語数の関係	108
図 B.1 各条件下での ROC 曲線	150

表目次

表 3.1 各知識領域の特徴語	35
表 3.2 各知識領域の区分	36
表 3.3 各知識領域の成熟度	38
表 3.4 各知識領域の特許数とその増加率.....	39
表 3.5 各知識領域間のコサイン類似度	40
表 3.6 各国の出版論文のうち未成熟・成長知識領域に属する数とその比率	42
表 3.7 各国の知識領域・研究機関における HIP 出版数の変動係数	44
表 3.8 各国の HIP 出版数上位 5 研究機関	45
表 3.9 各国の知識領域別 HIP 出版数	46
表 3.10 各知識領域の特徴語	48
表 3.11 各知識領域の区分	50
表 3.12 各知識領域の成熟度	52
表 3.13 各知識領域の特許数とその増加率.....	53
表 3.14 各知識領域間のコサイン類似度	54
表 3.15 各国の出版論文のうち未成熟・成長知識領域に属する数とその比率	56
表 3.16 各国の知識領域・研究機関における HIP 出版数の変動係数	57
表 3.17 各国の HIP 出版数上位 5 研究機関	58
表 3.18 各国の知識領域別 HIP 出版数	58
表 3.19 各知識領域の特徴語	61
表 3.20 各知識領域の区分	62
表 3.21 各知識領域の成熟度	64
表 3.22 各知識領域の特許数とその増加率.....	65
表 3.23 各知識領域間のコサイン類似度	67
表 3.24 各国の出版論文のうち未成熟・成長知識領域に属する数とその比率	68
表 3.25 各国の知識領域・研究機関における HIP 出版数の変動係数	70
表 3.26 各国の HIP 出版数上位 5 研究機関	71
表 3.27 各国の知識領域別 HIP 出版数	72
表 3.28 各国の研究力の分配方針	75
表 3.29 各国の出版論文のうち composit*を含む割合	78
表 4.1 各トレーニング期間とテスト期間の定義.....	86
表 4.2 100 材料単語の材料区分	94
表 4.3 出現論文数上位 20 材料単語の出現論文数.....	95

表 4.4 各材料区分の材料単語ペアのうち共起関係を持つ割合	96
表 4.5 出現論文数上位 10 材料単語の共起材料単語数	99
表 4.6 silica, CNT を含む材料単語ペアのテスト期間における共起生成の有無	99
表 4.7 各条件におけるリンク予測の結果.....	101
表 4.8 各 CN 指標のカットオフのテスト期間における予測精度	103
表 4.9 各 CNSH 指標のカットオフのテスト期間における予測精度.....	104
表 4.10 論文出版数上位 10 カ国の論文出版数と特徴の比較.....	105
表 A.1 各知識領域の特徴語.....	120
表 A.2 各知識領域の特許数とその増加率と特許の検索に用いた検索語.....	125
表 A.3 各国の HIP 出版数上位 5 研究機関	126
表 A.4 各知識領域の特徴語.....	129
表 A.5 各知識領域の特許の検索に用いた検索語	133
表 A.6 各国の HIP 出版数上位 5 研究機関	134
表 A.7 各知識領域の特徴語.....	138
表 A.8 各知識領域の特許数とその増加率と特許の検索に用いた検索語.....	142
表 A.9 各国の HIP 出版数上位 5 研究機関	143
表 B.1 出現論文数上位 100 材料単語の材料区分と登場論文数.....	146
表 B.2 各 100 材料単語の共起関係を持つ材料単語数	148

要旨

近年、多様な新技術・製品の現場において、複合材料が注目されている。複合材料とは複数種の方法から構成される界面を持つ材料であり、個々の材料の特性を足し合わせることが可能である。例えば、炭素繊維強化プラスチック(CFRP)はプラスチックと炭素繊維で構成された複合材料であり、軽量性と高強度性を併せ持つ。

複合材料の重要性を踏まえ、本研究では複合材料の開発支援に向けて複合可能な知識・材料の組み合わせを予測する手法を構築した。それを用いた実験では、複合材料に関する大規模な書誌情報のデータセットと提案手法を用いて、材料に関する既存知識の複合関係を分析し、複合によって新規知識を創出している知識・材料の組み合わせを明らかにした。

第 1 章では、本研究に至った背景と本研究の目的を述べている。材料分野では知識の急増に伴う知識の細分化が進む一方、知識の複合によって複合材料などの新規知識が創出されている。また、新規材料開発の効率化に向けて材料の物性データを活用した材料開発手法(マテリアルズインフォマティクス(MI))が近年登場した。しかし、材料の物性データはその材料自身に関する詳細な情報を含んでいるが、他の材料との関係情報は限定的である点に課題があることが知られている。新規知識は既存知識のネットワークの周辺に派生するため、新規材料の開発において材料に関する既存知識のネットワークを考慮することが有効であると考えられる。実際に、材料に関する既存知識のネットワークから新規熱伝導材料を予測することに成功している先行研究も存在する。

材料に関する既存知識のネットワークを基にした新規複合材料の予測についての先行研究は少ないが、本研究では、材料に関する既存知識のネットワークから複合材料に関する新規知識の予測が可能との着想の下、既存知識のネットワークの情報をもとに複合可能な知識・材料の組み合わせを検出する手法を構築し、新規複合材料の開発プロセスに貢献することを目指した。

第 2 章では、複合可能な知識・材料の組み合わせの予測に関する先行研究をレビューしている。具体的には、複合可能な材料と用途の組み合わせの予測手法とその用途(既存材料の用途開発)、新複合可能な材料と材料の組み合わせの予測手法とその用途(新規複合材料の開発)の 2 点を挙げている。

第 3 章では、複合可能な材料と用途の組み合わせの予測を行うための手法を提

案している。具体的には、複合可能な材料に関する知識領域(材料知識領域)と用途に関する知識領域(用途知識領域)の複合関係の分析から特定の用途に関して開発の余地がある材料を特定している。提案手法では、初めに、任意の分野の論文引用関係ネットワークをクラスタリングすることで知識領域を得る。次に、これらの知識領域を新たに提案したマトリクス上にマッピングし、それらの位置から成長率が高い「未成熟・成長知識領域」を特定する。この手法を用いた実験の結果、未成熟・成長知識領域では特許出願が高い増加率を示す、商業化が急速に進んでいる知識領域であることが示唆された。また、各知識領域間のコサイン類似度を算出した結果、複合材料知識領域が特定の用途知識領域と高い類似度を示した。

第4章では、複合可能な材料と材料の組み合わせの予測を行うための手法を提案している。既に複合が報告されている材料の組み合わせは、論文上での材料単語名の共起から特定することができる。そこで、複合可能な材料と材料の組み合わせの予測を、論文中で共起する材料単語の予測と捉えてモデルを構築している。具体的には、論文書誌情報を用いて材料単語の共起関係ネットワークを作成し、ネットワークのリンク予測によって複合可能な材料の組み合わせを予測する仕組みを構築した。実験の結果、作成した材料単語の共起ネットワークではグラフェンとカーボンナノチューブが持つリンクが急増していることが明らかとなった。また、材料単語の共起ネットワークを用いたリンク予測では **Common Neighbor** 指標を用いた場合に最も高い予測精度を示した。これらの結果から、材料単語は共起ネットワークにおいて近い距離にある材料単語(共通隣人ノードを持つ材料単語)と複合する傾向があるとの知見が得られた。また、提案手法を用いて複合が急速に進んでいる材料を特定することに成功した。

第5章では、政策形成や施策の運用、技術の商業化、研究計画の考案に対して、本論文で開発した手法や枠組みがどのように貢献できるかについて議論している。まず、政策形成等に対しては、第3章の提案手法を用いた実験により、各国の研究機関に属する研究者が発表した論文のうち未成熟・成長知識領域に属する割合から各国の未成熟・成長知識領域における優位性を評価できることを示した。次に、技術の商業化に対しては、第3章で構築した手法と事業の対象と考える領域のデータセットを用いて、商業化の余地がある知識領域を早期の段階で特定することができるものと考えられる。最後に、研究企画に関して、第4章で提案した複合可能な材料の予測手法が、具体的な研究テーマの選定指標と

しての活用が期待される。

第6章では、本論文の要点をまとめた上で、本研究の今後の展望を述べている。本論文では、複合可能な知識・材料の組み合わせを予測する手法を提案し、実データを用いた検証によりその有効性を確認した。本研究の提案手法は、複合材料の技術開発競争が激化する環境下において、競争優位に向けた意思決定を支援するものとなりうる。

1. 序章

本章では、本研究に至った背景と本研究の目的と本論文の構成を説明する。近年の材料分野では重要な課題が存在している。この課題の解決を本研究の目的とし、目的達成に向けた本論文の構想を立てる。

1.1. 本研究の背景

本節では、材料分野に存在する課題について説明する。

材料分野では知識の急増に伴う知識の細分化が進む一方、知識の複合によって複合材料などの新規知識が創出されている。また、新規材料開発の効率化に向けて材料の物性データを活用した材料開発手法(マテリアルズインフォマティクス(MI))が近年登場した。しかし、材料の物性データはその材料自身に関する詳細な情報を含んでいるが、他の材料との関係情報は限定的である点に課題があることが知られている。新規知識は既存知識のネットワークの周辺に派生するため、新規材料の開発において材料に関する既存知識のネットワークを考慮することが有効であると考えられる。

1.1.1. 知識の急増に伴う知識の細分化

17世紀はガリレオ、ニュートンらが多くの革新的な科学的発見をし、その後の科学技術の発展の基礎を築いたことから「科学革命の時代」と呼ばれている。例えば、当時の常識であった地球を中心に宇宙が動いていることを主張する天動説に対して、ガリレオは望遠鏡で金星の満ち欠けを観察したことで太陽を中心に地球が動いていることを主張する地動説を証明した。このように、「科学革命の時代」に実験や観察の結果から再現可能な方法で自説を証明する科学の根本的な手法が確立された。

科学的発見が増える一方、それらを世界に発信する手法も確立され始めた。その1つが論文であり、世界最古の論文誌は1665年に創刊された「ロンドン王立協会紀要(The Philosophical Transactions of the Royal Society)」と言われている(赤松, 2008)。論文誌の誕生によって先人の研究成果を基に次世代の研究者が新たな研究成果を生み出すというサイクルが確立され、以後の科学技術の発展速度を劇的に向上させた。

科学の発展が加速し続けた結果、2016年には1年間で約220万本という莫大な数の論文が出版された(Mudark, 2018)。これまでの科学の発展速度の推移を調査するために1980~2012年に出版された3800万件の論文が引用した論文数を出版年毎に数えた結果、年間論文出版数は3段階の増加率(18世紀半ばまでは約1%、20世紀半ばまでは約2~3%、近年までは約8~9%)であることが報告されている(Bornmann, 2015)。このように論文数は指数関数的に増加しており、科学の発展は今もなお加速し続けている。

しかし、論文数の増加は問題も引き起こす。その1つが知識の急増に伴う知識の細分化による科学分野の全体像の不明瞭化である。実際に、2003年に科研費の分科細目が改定された際に細目数が約30%増加しており、知識の細分化を表している(木村, 2004)。

知識が細分化した結果、専門家でさえも科学分野の全体像を把握することが難しくなっている。これの実証として、Petersらはすでに著名な論文誌に掲載されている12本の論文を18~32ヶ月後に著者とタイトルを変更してから再投稿を行い採択されるか検証した(Peters, 1982)。その結果、38名の査読者のうち再投稿に気づいたのはそのうちたった3名であった。したがって、専門家でさえも専門分野の論文を全て把握することは困難であることが明らかになった。さらに、冒頭で述べた通り年間論文出版数は増加の一途を辿っている点からも科学分野の全体像は今後も複雑化が進むことが予測されている。

材料分野においても知識の急増による知識の細分化が進んでいる。現在の材料分野には金属材料、有機材料、セラミックなど様々な知識が存在するが、初期の材料分野では金属材料に関する知識が大半を占めていた。実際に、世界で初めて出版された材料分野の書籍は金属材料に関するものであった(Biringuccio, 1540)。

しかしその後、金属材料以外の材料に関する知識も発展し始めた。例えば、1824年には非常に強度が高いセラミックであるセメントが開発され、現在でも建物やインフラなど幅広い場面で使用されている(Aspdin, 1824)。1839年には弾力性を持つ有機材料であるゴムの大量生産法が確立され、空気入りタイヤの製造が可能になったことで車の乗り心地が改善された(Goodyear, 1839)。1934年には有機材料であるナイロンが発明され、人工的に繊維を合成することが可能になった(Delaware, 2000)。ナイロンの発明によってストッキングや歯ブラシなどの安価で丈夫な製品の生産が可能になり、多くの人の生活の質を向上させた。

21 世紀の現代においても革新的な材料が登場し続けている。その 1 つが 2004 年に報告された炭素原子で構成されるシート状物質のグラフェンである (Novoselov, 2004)。グラフェンは導電性、強度、熱伝導性など多くの特性が優れており、そのためトランジスタ、太陽電池、電気二重層キャパシタなど様々なデバイスへの応用研究が行われている (Jo, 2012)。例えば、グラフェンを太陽電池に用いることで従来の太陽電池よりも優れた耐久性を持たせることに成功している (Singh, 2015)。

このように、これまで数々の革新的な材料が発明され、技術の発展に大きく貢献してきた。材料系データベース MatWeb には 2020 年 12 月現在約 140,000 種の材料のデータが存在しており、これまで膨大な数の材料が開発されてきたことを示している (MatWeb)。

しかし繰り返しになるが、知識の急増に伴う知識の細分化が分野の全体像を不明瞭化することが問題視されている。加えて、知識の細分化は「研究者のタコツボ化」という問題をも引き起こす。「研究者のタコツボ化」とは、研究者が自分の専門分野に閉じこもることで他の分野への知見が薄くなり、研究者の視野が狭くなる現象を指す (荻谷, 2007)。「研究者のタコツボ化」は共同研究や新興分野の誕生を阻害する恐れがあるため深刻な問題とされている。

実際に私は「研究者のタコツボ化」を実感した経験がある。当時私は新規半導体材料の開発を行っており、ある物質と約 20 種の物質それぞれを組み合わせた半導体材料を 1 つずつ合成し、優れた特性を示す新規新機半導体材料を探索していた (Fujisue, 2016)。しかし、実際には多数の物質が存在するにも関わらず、当時はわずか約 20 種の物質のみに着目していた。仮に当時広い視野を持っていたら、その 20 種の物質以外を対象にした実験や共同研究を行うことで新しい発見につながる可能性もあった。このように、研究者の視野が狭くなる「研究者のタコツボ化」は実際に研究の現場で起きている。「研究者のタコツボ化」は各専門領域の独自の発展を促すため、知識の細分化をより加速させる危険性がある。以上より、論文の誕生は科学の発展スピードを劇的に向上させたが、その一方で知識の細分化が課題とされている。

1.1.2. 知識の複合による新規知識の創出

知識の急増に伴う知識の細分化が進んでおり、材料分野もその例に漏れないことを前節で説明した。一方、細分化された知識同士を複合することで新規知識を

創出する取り組みも行われている。以下に材料分野における取り組みの例を 2 つ紹介する。

1 つ目は既存材料の用途開発である。例えば、Avco 社は航空宇宙機用の難燃性塗料 Chartek 59 を開発したが、その後この材料は石油精製所や化学プラントなど可燃性の製品を扱う工業施設にも用途展開されている(NASA, 2006)。また、本来ゴルフクラブなどのスポーツ用品向けに開発された材料である炭素繊維強化プラスチック(CFRP)が 1990 年頃から航空機や自動車へ用途を拡大したことも既存材料の用途開発の好例である。2015 年の CFRP のマーケットシェアのうち約 73%が航空機・自動車であり、現在の CFRP の主な用途は航空機・自動車であることを示している (Witten, 2018)。

2 つ目は新規複合材料の開発である。複合材料とは材料の特性の改善に向けて複数種の材料を組み合わせた材料であり、個々の材料間に界面を有する。例えば、CFRP は軽量性に優れたプラスチックと強度が高い炭素繊維を複合することで軽量性と高い強度を両立させた複合材料である。CFRP は自動車の燃費改善に活用されており、従来の鋼鉄製の車と比較すると CFRP 製の車は 36%軽量でエネルギー消費量を 15%抑制することに成功している (Suzuki, 2005)。また、プルシアンブルー(PB)とセルロースとポリウレタンを複合させた除染スポンジも高性能な複合材料の例である。PB は放射性物質を吸着する性質と水溶性を併せ持つ。それゆえ、海水など水中の放射性物質を回収するために PB を水中に投入しても分解するため、水中の放射性物質の回収は不可能であった。この課題の解決のために、非水溶性のセルロースと PB を複合させた非水溶性かつ放射性物質吸着可能な複合材料を合成し、さらにそれをスポンジに織り込ませることで水中の放射性物質の吸着後に回収が容易な形状にした。このスポンジの純水、人工海水での除染効率はそれぞれ 99.2%、99.9%であり、非常に高い除染効果を示している(Vipin, 2016)。

以上で紹介した例を始めとして、複合材料は高い性能を有し、多様な複合材料が開発されている。CNT の開発に携わった遠藤守信を始めとした世界トップレベルの研究者も複合材料に注目している点からも、材料分野において複合材料が重要視されていることが読み取れる (Noguchi, 2020; Takizawa, 2018; Silva, 2019)。

1.1.3. 複合材料の重要性

複合材料の中には既に実用化され、エネルギー資源枯渇問題や大気変動問題(以下「エネルギー・環境問題」と称する)の解決に貢献しているものも多く存在する。例えば、CFRPは自動車の燃費向上に活用されていることを前節で述べた。近年、エネルギー・環境問題は世界中の国が一丸となって解決に取り組まざるを得ない程深刻な状態となっている。現代の我々の生活において電気やガスは欠かせないが、それらは主に化石燃料を消費することで供給されている。しかし、その化石燃料が現在の消費のペースでは数十年後に枯渇すると推測されている(Shafiee, 2009)。化石燃料が枯渇すると車や自動車が使用不可能になるため、食料供給の滞りや電気やガスの使用不可など非常に深刻な事態を引き起こす。さらに、化石燃料の消費によって発生する温室効果ガスが引き起こす地球温暖化も重大な問題である。1850年以前地球の気温は温暖期と氷河期を繰り返しながら安定していたが、1906~2005年の100年間で気温は0.74°C上昇した(NRC, 2006)。気温の急上昇は海面の上昇や異常気象を引き起こし、生態系や人類へ大きな被害をもたらす(環境省, 2007)。

このような背景のもと、あらゆる分野でエネルギー・環境問題の解決に向けた高性能な複合材料の開発が行われている(Vilatela, 2012)。例えば太陽電池分野では、グラフェンとTiO₂の複合材料(G-TiO₂)製太陽電池は酸化チタン(TiO₂)製太陽電池よりも約30%高い変換効率を実現した(Ding, 2015)。再生可能エネルギーの1つである太陽電池は化石燃料の代替エネルギーとして注目されているが、実用化には変換効率が十分に高い必要がある。それゆえ、G-TiO₂のような変換効率が高い材料の開発が重要視されている。光触媒分野では、G-TiO₂がTiO₂よりも高い光触媒作用と安定性を示すことが報告されている(Zhang, 2010)。光触媒は人工的な水素製造手法として注目されており、光触媒作用と安定性の向上は水素製造の効率化において有効である。水素製造が注目されている背景には、エネルギーを化石燃料から水素に代替する動きがある。化石燃料は燃焼すると温室効果ガスを排出するが、水素は燃焼すると水のみを排出するクリーンなエネルギーであるため、エネルギーを化石燃料から水素への代替することで化石燃料の消費量とそれに伴う温室効果ガスの排出を抑制することが期待されている。そのため、水素製造に利用可能な高い光触媒作用と安定性を示す光触媒材料の開発が求められている。

このように、エネルギー・環境問題の解決に向けて様々な分野で複合材料を筆頭

に高性能な材料開発が行われている。材料開発は研究開発の基礎であり、実際にサステナビリティ分野の論文にはセルロースやカーボンなど材料に関する論文が多くを占めている(Asatani, 2020)。材料開発が研究開発において重要であるという観点から、エネルギー・環境問題の解決に向けた材料開発は国を掲げて推進されている。2015年に安倍前首相は「エネルギー・環境イノベーション戦略」を発表し(内閣府, 2016)、「省エネルギー」、「蓄エネルギー」、「創エネルギー」、「CO₂固定化・有効利用」、の4つの分野(図 1.1)の強化を掲げた。この戦略では、産学官連携研究開発投資の誘発や国際連携・国際共同研究の推進などを実施している。

各分野では開発に取り組む技術の具体例が挙げられている。例えば、「省エネルギー」分野では軽量かつ耐熱性を併せ持つ材料の開発、「蓄エネルギー」分野では従来のリチウムイオン電池を超える革新的蓄電池の開発、「創エネルギー」分野では太陽電池の新材料の開発、などがある。また、サステナビリティ分野の研究において蓄電池・太陽電池を含む電気化学は比較的新しく重要な領域の1つであるとされている(Asatani, 2020)。さらに、電気化学分野では新規複合材料開発が盛んであり、上記で説明したG-TiO₂のような高性能な複合材料の開発が重要視されている(Wang, 2020; Gong, 2018; Gong, 2019)。したがって、エネルギー・環境問題の解決に向けて、電気化学などの多様な分野で複合材料の開発が注目されている。

1.1.4. 複合材料の開発における課題

複合材料を含む新規材料開発の効率化に向けて、近年では材料の物性データを活用した材料開発手法(マテリアルズインフォマティクス(MI))が登場した。例えば、ポリプロピレンとフィラー及び添加物から成る効率的な複合材料の開発に向けた適切なポリプロピレンと含有率の組み合わせの予測手法が報告されている(池田, 2019)。この手法は、所望の物性を有する材料開発に向けて、効率的な組み合わせの選択を可能にすると考えられている。

しかし、材料の物性データはその材料自身に関する詳細な情報を含んでいるが、他の材料との関係情報は限定的である点に課題があることが知られている。新規知識は既存知識のネットワークの周辺に派生するため(Rzhetsky, 2015)、新規材料の開発において材料に関する既存知識のネットワークを考慮することが有効であると考えられる。実際に、材料に関する既存知識のネットワークから新規

熱伝導材料を予測することに成功している先行研究も存在する (Tshitoyan, 2019)。この手法では、論文書誌情報から材料と特性の関係ネットワークを作成し、ネットワークにおける熱伝導性と関係が強い材料は熱伝導性を有する可能性が高いと判断している。

1.2. 本研究の目的

近年では新規材料開発の効率化に向けて MI が活用されている。しかし、材料に関する既存知識のネットワークを基にした新規複合材料の予測についての先行研究は少ない。そこで本研究では、材料に関する既存知識のネットワークから複合可能な材料に関する新規知識の予測が可能との着想の下、既存知識のネットワークの情報をもとに複合可能な知識・材料の組み合わせを検出する以下 2 つの手法を構築し、新規複合材料の開発プロセスに貢献することを目指した。

1 つ目の手法である複合可能な材料と材料の組み合わせの予測では、既存材料の用途開発先を予測し、用途拡張の余地がある材料の特定を目指す。2 つ目の手法である複合可能な材料と材料の組み合わせの予測では、複合することで複合材料を構成する材料の組み合わせを予測し、開発可能な新規複合材料の特定を目指す。

1.3. 本論文の構成

前節で述べた本研究の目的の達成に向けて本論文は以下の構成をとる。

第 1 章では本研究が複合材料に着目した背景を説明し、複合材料の開発促進が本研究の目的であることを述べる。第 2 章では複合可能な知識・材料の予測に関する先行研究を紹介する。その上で、本研究の位置付けについて説明する。第 3 章では用途開発の余地がある材料の特定に向けた複合可能な材料と用途の組み合わせの予測の手法について述べる。また、この手法の結果を基に複合材料の開発の重要性を主張する。第 4 章では第 3 章で明らかになった複合材料の重要性を踏まえた上で、新規複合材料の開発に向けた複合可能な材料と材料の組み合わせの予測の手法について説明する。第 5 章では本研究の期待される本研究の貢献性を議論する。最後に第 6 章では各章の要点をまとめ、本研究の今後の

展望を述べる。

2. 先行研究

本章では、複合可能な材料・知識の組み合わせの予測に関する先行研究をレビューする。その上で、先行研究に対する本研究の位置付けを説明する。

2.1. 先行研究

1.1.2 で述べたように、材料分野では知識の複合による新規知識の創出が行われている。近年では複合可能な知識を効率的に特定するために情報処理技術が活用されており、このような取り組みはマテリアルズ・インフォマティクス(MI)と呼ばれている。本節では、複合可能な材料と用途の組み合わせと複合可能な材料と材料の組み合わせの予測に関する MI の先行研究を紹介する。

2.1.1. 複合可能な材料と用途の組み合わせの予測

複合可能な材料と用途の組み合わせの予測では、論文や特許の書誌情報が活用されている。例えば、自動車と航空機間の移転可能な技術の予測では、特許の引用関係と類似度を用いて航空機に使用されている繊維強化セラミクスが自動車の排ガス浄化装置への適性が高いことを特定している (Nakamura, 2015)。また、CFRP と傾斜機能材料間の移転可能技術の予測では、特許分類の階層を用いて CFRP が衣料品への用途拡張可能性の高さを特定している (Sasaki, 2020)。

2.1.2. 複合可能な材料と材料の組み合わせの予測

複合可能な材料と材料の組み合わせの予測では、材料の物性値を基にした新規複合材料の物性値の予測が行われている(Liu, 2015)。物性値の算出方法には、データマイニング、ニューラルネットワーク、類似度測定などがある (Yu, 2009; Hassan, 2009; Doreswamy, 2010)。新規複合材料の候補のうち作製するターゲットを物性の予測値が高いものみに絞ることで、材料開発コストの削減を可能にしている。なお、近年では実際に MI を活用した高圧下で超電導を示す新規材料の開発に成功している(Matsumoto, 2018)。

2.2. 先行研究を踏まえた本研究の位置付け

1.2 で説明した通り、本研究では以下 2 つの手法を提案する。

- ① 複合可能な材料と用途の組み合わせの予測
- ② 複合可能な材料と材料の組み合わせの予測

2.1.1 で紹介した先行研究では、複合可能な材料と用途の組み合わせを細かい粒度 (単語レベル) で予測することを目的としている。これに対して本研究で提案する複合可能な材料と用途の組み合わせの予測手法は、大まかな粒度(知識領域レベル)で複合可能な材料と用途の組み合わせの予測を目指す。本論文の第 3 章では、用途開発の余地がある材料知識領域の特定に向けて、用途知識領域と複合可能な材料知識領域の予測を行う。

2.1.2 で紹介した先行研究では、材料の物性情報を基にした新規複合材料の物性値の予測を目的としている。これに対して本研究で提案する複合可能な材料と材料の組み合わせの予測手法は、論文書誌情報を基に複合可能な材料の組み合わせの特定を目指す。物性値とは異なり、論文書誌情報は研究者の判断(複合する材料と材料の組み合わせの選択)に関する情報を含んでいる。したがって、論文の書誌情報に含まれている既存の材料の複合関係から新規の複合可能な材料の組み合わせの予測が可能であるという仮定のもと、本論文の第 4 章では論文書誌情報を基にした複合可能な材料の組み合わせの予測を行う。

3. 複合可能な材料と用途の組み合わせの予測

本章では、複合可能な材料と用途の組み合わせの予測手法を提案する。なお、本章は PICMET 2017 にて発表した内容を基に記載している(Fujisue, 2017)。

3.1. 先行研究

1.1 で説明したように、論文数の急増に伴う知識の細分化が進んでいる。この問題に対する取り組みとして、膨大な論文書誌情報の可視化による知識の構造的俯瞰が行われている(Boyack, 2005; Chen, 2004; Chen, 2006)。論文書誌情報の可視化は現状把握だけではなく、今後成長する知識領域の予測にも活用されている(Börner, 2003)。研究のリソースが限られている研究者にとって、イノベーション創出につながる可能性が高い研究テーマの選定のために成長の見込みがある知識領域を予測することは重要である。なお、ここで言うイノベーションとは、新しく開発された技術が社会に普及して人々の生活にインパクトを与える現象を指す。

イノベーションの例の 1 つに人工肉がある。人工肉とは、牛、豚、鶏などの食用の肉の味を人工的に再現した加工食品である。人工肉が開発された背景にはいくつかの社会問題があり、その 1 つに環境問題がある。畜産によって排出される温室効果ガスは全体の排出量の 14.5~18%を占めており(Friedman, 2018)、人工肉の普及によって畜産の規模が縮小することで温室効果ガスの排出量を抑制することが期待されている。なお、人工肉の市場規模は順調に普及拡大しており 2023 年には 1500 億円まで増加する見込みであり (JMAR, 2019)、莫大なイノベーションを起こし始めている。

人工肉の例のように、イノベーション創出には新しい技術の開発だけではなくその技術が社会に普及することが必要である。それゆえ、イノベーション創出には解決する社会問題の決定、研究開発、生産、販売、などのあらゆる活動が欠かせない。したがって、イノベーション創出はこれらの活動を担当する組織間の連携が必要であり、これの説明として大学・企業・政府が互いに相互作用を起こしながらイノベーションを創出する「トリプルヘリックス構造」が提唱されている(Leydesdorff, 1996)。以下、大学・企業・政府の各組織間の相互作用について説明する。

- 大学-企業間の相互作用
 大学は研究活動による新規技術の創出、企業は新規技術の商業化を役割としている(Godin, 2006)。例えば、MIT メディアラボでは Google などの企業の支援のもと学生が新商品の基礎となるアイデアを創り、企業はそのアイデアを基にした商品開発を行っている(Moss, 2011)。なお、現代の生活に欠かせないタッチスクリーンや GPS の基となる技術はメディアラボで開発されたものである。
 - 企業-政府間の相互作用
 企業は税金の納付による政府の政策活動の資金提供、政府は産業規制による平等な企業競争環境の整備を役割としている。例えば、政府は特許の侵害を防ぐ規制の制定などを行い、企業が安全に事業を行う環境を確保している(Sampat, 2006)。
 - 政府-大学間の相互作用
 政府は社会課題の解決に向けた科学技術政策の推進、大学はその政策下での新規技術創出を役割としている。例えば、政府は少子高齢化などの社会問題の解決に向けて、将来目指す社会像として Society 5.0 を掲げている(内閣府, 2018)。Society 5.0 の実現に向けた投資戦略として「未来投資戦略 2018」が策定され、政府からの大学の研究活動に対する戦略的な投資が行われている。
- 以上より、イノベーション創出において大学・企業・政府はそれぞれ重要な役割を担っており、各組織間で相互作用を起こしながら互いの活動を促進させている。したがって、イノベーション創出を促進するためには大学・企業・政府の活動とそれらの相互作用を包括的に俯瞰する必要がある。これまで大学・企業・政府の各組織の活動（以下「研究活動」、「商業活動」、「政策活動」と称する）の俯瞰手法が報告されており、以下にその例を紹介する。

3.1.1.研究活動の俯瞰：論文の引用関係ネットワークの利用

研究活動の俯瞰手法では、論文書誌情報の可視化による知識領域の構造的把握が行われている。”A Global Map of Science”, “Science overlay map”, “VOS mapping”などがその例に当たる(Leydesdorff, 2009; Rafols, 2010; Waltman, 2010)。

これらの手法では、論文の引用関係ネットワークのクラスタリングによって研究内容が近い論文同士をグループに分け、各グループに含まれる論文の内容を

精査することで知識領域を把握する。引用関係にある論文同士は研究内容が近い傾向があるため、引用関係ネットワークのクラスタリングによって得られる論文のグループは1つの知識領域とみなすことができる。

学術俯瞰マップも研究活動の俯瞰手法の1つであるが(Kajikawa, 2007)、この手法では任意の分野の研究活動を俯瞰する。上記で述べた”A Global Map of Science”等と比較すると、学術俯瞰マップは俯瞰する範囲を狭める分、知識領域を細かく分析することが可能である(Kajikawa, 2009; Kajikawa, 2008)。

3.1.2. 商業活動の俯瞰: クラスタ間の類似度の利用

商業活動の俯瞰手法では、研究活動と商業活動の関係を分析している。論文と特許それぞれの書誌情報から得られた知識領域間の関与性を分析することで、研究活動で創出された新規知識のうち商業化の余地があるものを特定する。

論文と特許はそれぞれ研究活動と商業活動の成果を公開する手法である。論文と特許には強い関係性があり、実際にアメリカで過去40年間に発表された論文3200万件のうち80%は特許に発展し、特許の61%は論文を参考にしている(Ahmadpoor, 2017)。以下、論文と特許の書誌情報から研究活動と商業活動の関係を分析する手法を2つ紹介する。

1つ目は、研究活動と商業活動の全体像の比較による商業化の余地がある知識領域の特定手法である(Shibata, 2010)。この手法では初めに、論文と特許の書誌情報を収集し、研究活動と商業活動それぞれに存在する知識領域を定義する。次に、それらの知識領域を比較することで研究活動には存在するが商業活動には存在しない知識領域を特定する。それらはまだ基礎研究の段階にあるが今後商業化が進む可能性が高い知識領域であると推測できる。

2つ目は、研究活動と商業活動それぞれの成長知識領域を比較し、商業化の余地がある知識領域を特定する手法である(Mejia, 2020)。この手法ではまず、論文と特許の書誌情報を収集し、研究活動と商業活動それぞれに存在する知識領域を定義する。次に、これらの知識領域のうち成長率が高いものを成長知識領域と定義する。研究活動に存在するが商業活動に存在しない知識領域は商業化の余地があり、反対に、商業活動に存在し研究活動に存在しない知識領域は産学連携の余地があると推測できる。この手法は、産学連携の余地がある技術の特定への応用が期待されている。

3.1.3.政策活動の俯瞰：マトリクスの利用

政策活動の俯瞰手法では、各国の研究活動方針を比較している。各国の政府は自国の研究活動と商業活動の支援のために大学と企業に投資している。しかし、予算には限りがあるため費用対効果が高い予算配分を行う必要がある。そこで、強化が必要な知識領域への重点的な投資に向け、政府は予算配分を定義した科学技術政策を制定している。

科学技術政策を制定する上で科学技術のトレンドは重要な観点である。現在世界各国で盛んな研究活動が行われており、科学技術は日進月歩で発展し続けている。それゆえ、自国の優勢あるいは劣勢な知識領域を客観的な視点で把握することが適切な科学技術政策の制定につながる。これにより自国が今後強化すべき知識領域の合理的な判断が可能になり、費用対効果が高い予算配分を実現できる。以下、各国の研究活動方針の比較による優勢/劣勢な知識領域の把握手法を2つ紹介する。

1つ目は、マトリクスを用いて知識領域を4つの区分に分類し、各区分の論文出版数の比率を算出する手法である(Saka, 2014)。この手法では初めに、論文の共引用関係ネットワークのクラスタリングにより知識領域を定義する。次に、これらを継続性と他の知識領域との関与性の2軸で構成されたマトリクスにマッピングし、知識領域の位置によって知識領域を次の4つの区分に分類する。継続性が高い尚且つ他の知識領域との関与性が強いものを「コンチネント型」、関与性が弱いものを「アイランド型」、継続性が低い尚且つ他の知識領域との関与性が強いものを「ペニシュラン型」、関連性が弱いものを「スモールアイランド型」とする。その結果、日本は「スモールアイランド型」の比率が他国よりも低いため、小さいが個性的な知識領域の強化が課題であると判断されている。

2つ目は、各国の出版論文から得られた知識領域をマトリクスにマッピングし、その位置を比較する手法である(Watatani, 2013)。この手法ではまず、幹細胞分野の論文を出版国ごとに分類し、各出版国の論文同士の共引用ネットワークを作成する。次に、各ネットワークをクラスタリングすることで各国の幹細胞分野の研究活動に存在する知識領域を定義する。これらの知識領域を引用数と引用数の増加率の2軸から成るマトリクスにマッピングし、各国の知識領域の位置を比較する。その結果、中国では化学と材料科学の複合分野、日本では基礎生物学、アメリカでは医療・製薬への応用研究に関する知識領域がそれぞれ高い成長率を示しており、各国の研究傾向の違いを反映した。

3.2. 提案手法

本節では、前節で紹介した先行研究の課題と提案手法の目的と手順を述べる。先行研究では、研究活動・商業活動・政策活動の包括的な俯瞰が課題とされている。この課題の解決を提案手法の目的とし、目的達成に向けた提案手法の具体的な手順を説明する。

3.2.1. 提案手法の目的

提案手法では、論文書誌情報を用いた研究活動・商業活動・政策活動の包括的な俯瞰を行う。先行研究では研究活動・商業活動・政策活動のいずれかを俯瞰するケースが多く、これら全てを包括的に俯瞰する手法は少ない。しかし、**Error! Reference source not found.**で述べたようにイノベーションはこれらの活動間の相互作用を経て創出される。それゆえ、研究活動・商業活動・政策活動を単体ではなく集合体として包括的に俯瞰することがイノベーション創出の促進を考える上で重要である。

そこで提案手法では、研究活動・商業活動・政策活動の相互関係を包括的に俯瞰する手法の構築を目指す。**Error! Reference source not found.**で紹介した先行研究の参考の下、提案手法ではクラスタリング・ヒートマップ・マトリクスを組み合わせた分析を行う。以下、研究活動・商業活動・政策活動間の各相互作用を俯瞰する手順を述べる。

- 研究活動-商業活動間の相互作用
論文の引用ネットワークのクラスタリングによって知識領域を定義する。これらを材料開発あるいは用途開発に関する知識領域（以下それぞれ「材料知識領域」、「用途知識領域」と称する）に分類する。次に、材料知識領域と用途知識領域間の関与性の時系列変化を分析する。時系列変化をもとに今後関与性が強くなる材料知識領域と用途知識領域の組み合わせを予測し、その材料知識領域を用途開発の余地があるとみなす。
- 商業活動-政府活動間の相互作用
論文数と平均出版年の 2 軸から成るマトリクスに知識領域をマッピングし、マトリクスを 6 つのエリアに分割して知識領域を 6 区分に分類する。この時最も平均出版年が若い尚且つ論文数が少ないエリアに位置する知識領域を「未成熟・成長知識領域」と定義する。

これまで知識領域の成熟度は平均出版年や論文数の増加率など 1 つの軸で評価されてきた(Takeda, 2009; Rotolo, 2016)。しかし、年間論文出版数は年々増加しているため、知識領域の中には誕生して間もないが既に多くの論文数が発行され既に成熟している場合がある。そのため、知識領域の成熟度を正確に評価するには、従来の評価軸である論文数と平均出版年を独立させて考慮する必要がある。提案手法では、論文数と平均出版年の 2 軸のマトリクスを用いて正確な知識領域の成熟度の評価を試みた。

次に、各国の出版論文のうち未成熟・成長知識領域に属する割合を算出し、その値から各国の未成熟・成長知識領域に対する集中度合いを比較する。

- 政府活動-研究活動間の相互作用

各国の出版論文のうち未成熟・成長知識領域に属するものを出版研究機関と知識領域ごとに数え、研究機関と知識領域それぞれにおける論文出版数の分散を算出する。また、ここで得られた値から各国の研究力の配分方針を一極集中型あるいは分散型と定義する。

提案手法では、上記で述べた研究活動-商業活動間の相互作用の俯瞰によって複合可能な材料と用途の組み合わせの予測を行う。加えて、商業活動-政策活動間と政策活動-研究活動間の相互作用を俯瞰し、イノベーション創出に向けた政策活動の意思決定の支援を目指す。

3.2.2.提案手法の概要

提案手法の手順は以下の 6 段階である。

- ① 分析対象分野に関する論文の抽出(3.2.3)
- ② 論文の引用ネットワークの作成とクラスタリング(3.2.4)
- ③ クラスタの特徴語算出(3.2.5)
- ④ 知識領域間の関与性係分析(**Error! Reference source not found.**)
- ⑤ 知識領域の成熟度算出(3.2.7)
- ⑥ 各国の研究活動方針の比較(3.2.8)

以下、各手順の詳細を説明する。

3.2.3.分析対象分野に関する論文の抽出

分析対象分野をカバーできる検索語を設定し、タイトル、アブストラクト、キーワードのいずれかが設定した検索語を含む論文を the Institute for Science

Information(ISI)が運営する論文データベース the Science Citation Index(SCI)から抽出する。データベースのアクセスには、Clarivate Analytics が管理している論文引用検索サービス Web of Science(WoS)を使用した。論文引用検索サービスはいくつか存在するが、正確に知識領域の成熟度を評価するためには古い文献も分析することが必要である。そのため、提案手法では幅広い出版年の文献を取り扱う WoS を使用した。

3.2.4.論文の引用ネットワークの作成とクラスタリング

抽出した論文のうち引用関係同士にある論文を結ぶことで引用ネットワークを作成した。引用関係には、直接引用・共引用・書誌的結合の3種が存在するが、提案手法では新興知識領域の検出に最も有効な直接引用を採用した(Fujita, 2014; Shibata, 2009; Klavans, 2006)。抽出した論文のうち分析対象分野と関連が弱い論文を排除するため、作成した引用ネットワークの最大連結部に含まれる論文のみを提案手法の分析対象とした。

次に、トポロジカルクラスタリング手法を用いて最大連結部を複数のクラスタに分割した(Newman, 2004; Newman, 2004)。クラスタは最大連結部のボトルネックを排除することで得られる。ボトルネックとはクラスタ間をつなぐ少数のリンクであり、ネットワーク上の移動に着目した時、多くの移動で通過されるリンクがボトルネックである。このボトルネックを最大連結部から排除するとクラスタ間のリンクが排除され最大連結部が複数のクラスタに分割される。各クラスタには研究内容が近い論文同士が多く含まれるため、クラスタを1つの知識領域とみなすことができる。上記の手順を図示したものが図 3.1 である。なお、提案手法では十分に細かい粒度の知識領域を得るためにクラスタリングを3回行った。

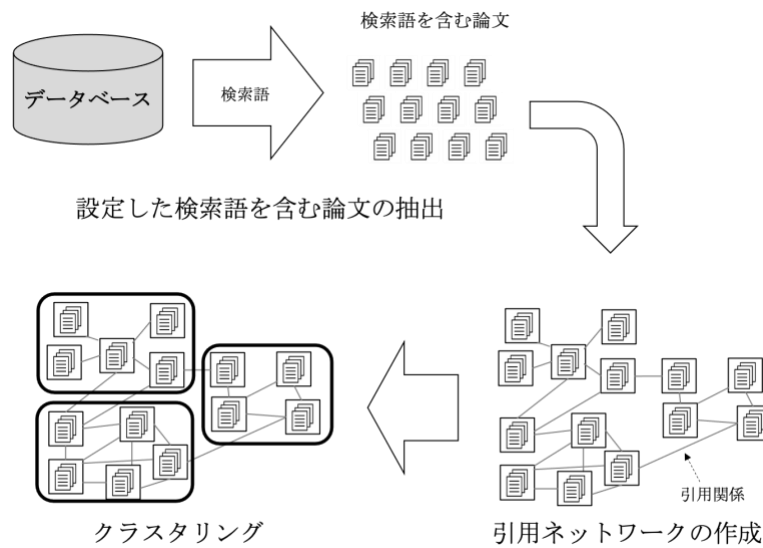


図 3.1 引用ネットワークのクラスタリング

3.2.5. クラスタの特徴語算出

3.2.3 で得られた知識領域の内容を把握するため、各知識領域の特徴語を算出し、それを基にしたラベル付けを行った。特徴語とは、他の知識領域よりもその知識領域における出現頻度が高い単語を指す。特徴語の判断指標として提案手法では TF-IDF(Term Frequency-Inverse Document Frequency)を採用した。TF-IDF とは TF と IDF の積であり、TF は単語の出現頻度、IDF は文章集合中の希少さを表す。TF, IDF, TF-IDF の定義を以下式(3.1)、(3.2)、(3.3)に記す。

$$TF(t, d) = \log(1 + f_{t,d}) \dots (3.1)$$

$$IDF(t, D) = \log \frac{N}{|d \in D : t \in d|} \dots (3.2)$$

$$TF - IDF(t, d, D) = TF(t, d) \times IDF(t, D) \dots (3.3)$$

t: 単語、d: 文章、D: 文章群

3.2.6. 知識領域間の関与性分析

コサイン類似度を用いて 3.2.3 で得た知識領域間の関与性を分析した。コサイン

類似度とは文章のベクトル同士が成す角のコサインである。文章間の成す角が0°に近い(類似度が高い)程値は1に近づき、90°に近い(類似度が低い)程値は0に近づく。TF-IDFによってベクトル化した文章A・B間のコサイン類似度は以下の式(3.4)で求められる。提案手法では、コサイン類似度の値から知識領域間の関与性を判断した。

$$\cos(A, B) = \frac{A \cdot B}{\|A\| \|B\|} \dots (3.4)$$

次に、各知識領域間のコサイン類似度の時系列変化から今後コサイン類似度が増加する知識領域の組み合わせを予測した。知識領域に含まれる論文のうち、ある時点までに出版された論文のコサイン類似度と全ての期間に出版された論文のコサイン類似度の差分から時系列変化を分析した。提案手法では、コサイン類似度が急増している知識領域の組み合わせは今後もコサイン類似度が増加する可能性が高いとみなした。

3.2.7. 知識領域の成熟度算出

知識領域をマトリクス(図 3.2)にマッピングし、その位置によって知識領域を成熟度ごとに分類した。マトリクスは平均出版年とクラスタに含まれる論文数の2軸(以下それぞれ「x軸」、「y軸」と称する)で構成される。x軸を第1四分位と第3四分位で区切り、平均出版年が古い区間から順にA(停滞)、B(中間)、C(成長)とする。y軸を第2四分位で2つに区切り、論文数が多い区間から順にa(成熟)、b(未熟)とした。区切られた2軸によってマトリクスをAa、Ab、Ba、Bb、Ca、Cbの6つのエリアに分割し、Cbにマッピングされた知識領域を「未成熟・成長知識領域」、それ以外を「成熟知識領域」と定義した。

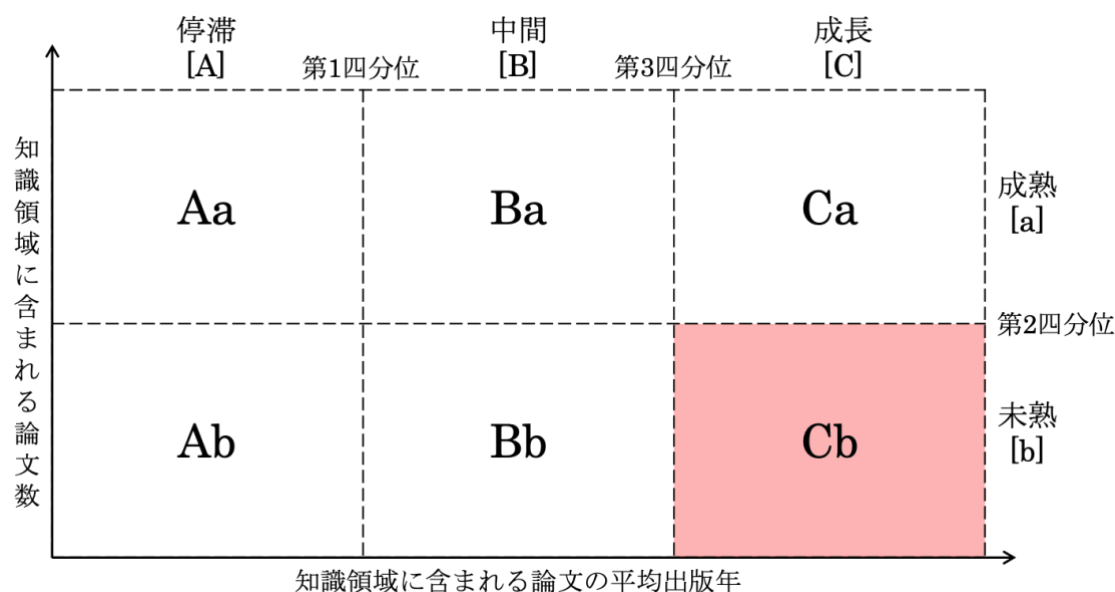


図 3.2 提案手法で定義するマトリクス

3.2.8.各国の研究活動方針の比較

3.2.7 で定義した未成熟・成長知識領域について、以下 2 つの分析を行った。

1 つ目の分析では、論文出版数上位 10 カ国各国の出版論文のうち未成熟・成長知識領域に属する割合を式(3.5)より算出した。この値を基に各国の未成熟・成長知識領域に対する集中度合いを比較した。

(未成熟・成長知識領域への集中度合い)

$$= \frac{\text{未成熟・成長知識領域に属する論文出版数}}{\text{論文出版数}} \dots (3.5)$$

2 つ目の分析では、論文出版数上位 4 カ国(アメリカ・中国・韓国・日本)について、各未成熟・成長知識領域に属する論文のうち被引用数上位 100 論文(以下”High Impact Paper(HIP)”と称する)の出版数を研究機関ごと、知識領域ごとに数えた。各国の論文出版数の機関毎の分散を式(3.6)で算出し、各国の研究力の分配方針を一極集中型または分散型に評価した。

$$s^2 = \frac{1}{n} \sum_{n=0}^n (x_i - \bar{x}) \dots (3.6)$$

3.3. 結果

本節では、まず初めに研究開発の強化が課題である分野の条件を定義し、それに該当する 3 分野の提案手法の分析結果を記載する。

3.3.1. 分析対象分野の選択

以下 3 つの観点から研究開発の強化が課題である分野の条件を定義し、それに該当する 3 分野を提案手法の分析対象として選択した。

1 つ目の観点は、エネルギー・環境問題解決への貢献性である。1.1.3 で述べたようにエネルギー・環境問題は年々深刻化しており、一刻も早い解決が求められている。2015 年に安倍前首相が表明した「エネルギー・環境イノベーション戦略」では、エネルギー・環境問題の解決に向けて強化が重要である分野を指定している。

2 つ目の観点は、研究開発における材料開発の比重である。高品質・高性能な部品や高精度な加工技術を提供する材料産業は、日本の経済発展の基盤となる産業の 1 つである。このような産業の発展によって日本は国際的地位を高めてきた。経済産業省が提唱した「新経済成長戦略」では、日本が引き続き産業のトップを維持するためには、部品・材料開発などの強化が重要であると主張している（経済産業省, 2006）。しかし、川上産業である部品・材料開発は、商品開発などの川下産業とは異なり、その用途の見通しが不透明な場合がある。それゆえ、部品・材料開発の費用対効果の見積は難しく、投資が消極的になる傾向がある。そこで投資の費用対効果が期待できる部品・材料を予測することで、部品・材料の開発への投資を促進することが期待されている。

3 つ目の観点は、デバイスとの関与性である。新規技術はデバイスという形で社会に普及する。また、普及したデバイスが使用されることで、その技術は初めて価値を発揮することができる。デバイスは部品・材料から構成されており、デバイスの性能向上には材料開発が欠かせないことを 1.1.3 で説明した。

以上 3 つの観点から、提案手法ではエネルギー・環境問題解決への貢献性と材料開発の比重とデバイスとの関与性が高い分野が強化の必要があると判断した。科学技術振興機構(JST)が報告している「俯瞰ワークショップ報告書 平成 27 年度エネルギー技術分野 最新研究開発動向」では、1 つ目の観点であるエネルギー・環境問題の解決に向けた分野の具体例が掲載されている。ここではそれらの

分野を「エネルギーと物理」、「エネルギーと化学」、「エネルギーと生物」の3つに分類している(JST, 2017)。これらのうち「エネルギーと化学」では材料がキーテクノロジーと述べられており、2つ目の観点である材料開発に比重を置く分野に該当している。「エネルギーと化学」の中でも3つ目の観点であるデバイスに関する分野のうち、用途がそれぞれ「省エネルギー」、「蓄エネルギー」、「創エネルギー」に該当する電界効果トランジスタ(FET)、電気二重層キャパシタ(EDLC)、光触媒を提案手法の分析対象分野に選択した(田島, 2014; 足立, 2013)。

3.3.2.FET

本節では、3.2で説明した手法でFET分野を分析した結果を述べる。

3.3.2.1. 分析対象分野の概要

FETとは電界の電圧を調整することで電流のON/OFFの切り替えが可能なデバイスであり、消費電力を調節する機能を持つ。また、他のトランジスタに比べて小型化が容易であり、身近な製品では電卓やモーターなどに用いられている。FETの起源は1926年に考案された電界効果の理論と言われており(Lilienfeld, 1930)、その後この理論を基にFETはデバイスとして具現化した。以後FETの研究開発が行われ、従来のFETより製造プロセスが容易なMOSFETや少ないエネルギーで動作するトンネルFETなどより高性能なFETが開発された。さらに、FETに用いられる半導体材料はシリコンが最も一般的だが、有機半導体材料を用いた有機電界効果トランジスタ(OFET)(Tsumura, 1986)、カーボンナノチューブ(CNT)を用いたCNTFETなど様々な半導体材料を用いたFETが登場し始めた(Tans, 1998; Martel, 1998)。その中でも近年開発されたグラフェンFETは非常に高い電気伝導性を示すことが報告されており(Lin, 2011)、今後の実用化への期待が高まっている。このように、これまでのFETの性能向上には材料が大きく貢献しており、今後も新しい半導体材料を用いた高性能なFETが登場することが予測されている(服部, 2019)。

3.3.2.2. 知識領域の抽出とラベリング

検索語を”field AND effect AND transisto*”(*はワイルドカード)に設定し、タイトル、アブストラクト、キーワードのいずれかに設定した検索語が含まれる論文を抽出した。抽出した論文同士の引用ネットワークを作成し、十分に細かい知

識領域を得るために3回クラスタリングを行った。

① クラスタリング1回目

抽出した論文のうち最大連結部に含まれる割合は約92%(47567本中43811本)であった。この最大連結部のクラスタリングの結果110個のクラスタが得られ、それぞれに含まれる論文数は降順に14519, 13015, 12180, 1475...2であった。以下、論文数がa番目に大きいクラスタを“#a”と称する。これらのクラスタのうち提案手法では論文数が多い#1, #2, #3を分析対象とした。

② クラスタリング2回目

#1~3を再度クラスタリングし、より細かいクラスタ(サブクラスタ)を得た。以下、クラスタ#aから派生したサブクラスタのうちb番目に論文数が多いものを“#a-b”と称する。提案手法では論文数が多い#1-1~3, #2-1~3, #3-1~3を分析対象とした。

③ クラスタリング3回目

#1-1~3, #2-1~3, #3-1~3を再度クラスタリングし、より細かいクラスタ(サブサブクラスタ)を得た。以下、サブクラスタ#a-bから派生したサブサブクラスタのうちc番目に論文数が多いものを“#a-b-c”、またサブサブクラスタを「知識領域」と称する。提案手法では、得られたサブサブクラスタのうち論文数が多い#1-1-1~3, #1-2-1~3, #1-3-1~3, #2-1-1~3, #2-2-1~3, #2-3-1~3, #3-1-1~3, #3-2-1~3, #3-3-1~3を分析対象とした。

表3.1に示す各知識領域の特徴語をもとにそれぞれ#1-1-1酸化亜鉛ナノワイヤ、#1-1-2CNT、#1-1-3トンネルFET、#1-2-1イオンFET、#1-2-2ナノワイヤ、#1-2-3ナノカーボン、#1-3-1グラフェン、#1-3-2二硫化モリブデン、#1-3-3黒りん、#2-1-1接触抵抗、#2-1-2ゲート絶縁体、#2-1-3単結晶FET、#2-2-1誘導体、#2-2-2共役系高分子、#2-2-3オリゴマー、#2-3-1ポリチフェン(P3HT)、#2-3-2共役系高分子、#2-3-3発光FET、#3-1-1歪みシリコン、#3-1-2ドープニング、#3-1-3ヒ化インジウム、#3-2-1二次元電子ガス、#3-2-2電流コラプス、#3-2-3不動態、#3-3-1強誘電体、#3-3-2酸化インジウムガリウム亜鉛(IGZO)、#3-3-3溶液法、と名付けた。なお、各知識領域の上位10TF-IDFの特徴語は付録の表A.1に記載した。

表 3.1 各知識領域の特徴語

知識領域	単語	TF-IDF	知識領域	単語	TF-IDF	知識領域	単語	TF-IDF
#1-1-1	nanowires	0.0085	#1-3-3	black phosphorus	0.0151	#2-3-3	light emitting	0.0062
	zno	0.0040	#2-1-1	contact	0.0027	#3-1-1	strained	0.0073
#1-1-2	carbon nanotube	0.011	#2-1-2	dielectric	0.0044		sige	0.0047
#1-1-3	tfet	0.0074	#2-1-3	single crystal	0.0028	#3-1-2	delta doped	0.0048
	tunneling	0.0043	#2-2-1	derivative	0.004	#3-1-3	inas	0.0022
#1-2-1	ion	0.0044	#2-2-2	polymer	0.0105	#3-2-1	dimensional electron gas	0.0027
#1-2-2	nanowire	0.0043		conjugated	0.0063	#3-2-2	current collapse	0.0041
#1-2-3	graphene	0.0076	#2-2-3	oligothiophenes	0.0041	#3-2-3	passivation	0.0028
	carbon nanotube	0.0067		oligomers	0.0035	#3-3-1	ferroelectric	0.0036
#1-3-1	graphene	0.0166	#2-3-1	p3ht	0.0117	#3-3-2	igzo	0.0094
#1-3-2	mos2	0.0238	#2-3-2	conjugated	0.0051	#3-3-3	zno	0.0069

特徴語をもとに各知識領域を「材料知識領域」、「用途知識領域」、いずれにも分類されない「その他知識領域」の3つの区分に分類した(表 3.2)。材料知識領域、用途知識領域、その他知識領域にはそれぞれ15個、4個、8個の知識領域が分類された。材料知識領域には、#1-1-1 酸化亜鉛ナノワイヤ、#1-1-2CNT、#1-2-2 ナノワイヤ、#1-2-3 ナノカーボン、#1-3-1 グラフェン、#1-3-2 二硫化モリブデン、#1-3-3 黒りん、#2-2-1 誘導体、#2-2-2 共役系高分子、#2-2-3 オリゴマー、#2-3-1 ポリチフェン(P3HT)、#2-3-2 共役系高分子、#3-1-1 歪みシリコン、#3-1-3 ヒ化インジウム、#3-3-2IGZO が分類された。用途知識領域には、#1-1-3 トンネルFET、#1-2-1 イオンFET、#2-1-3 単結晶FET、#2-3-1 ポリチフェン(P3HT)、#2-3-3 発光FET が分類された。その他知識領域には、#2-1-1 接触抵抗、#2-1-2 ゲート絶縁体、#3-1-26 ドーピング、#3-2-1 二次元電子ガス、#3-2-2 電流コラプス、#3-2-3 不動態、#3-3-1 強誘電体、#3-3-3 溶液法が分類された。

材料知識領域に着目すると、ナノカーボン材料(CNT、グラフェン等)、有機材料(オリゴマー、P3HT 等)、無機材料(シリコン、黒りん等)を含む多様な半導体材料に関する知識領域が見られた。用途知識領域では、医療分野で対象物質の検出に活用されるイオン FET やセンサーFET、ディスプレイの素子である発光 FET、エネルギー効率が高いトンネル FET など多様な用途に関する知識領域が見られた。その他知識領域では、半導体材料以外の FET の構成材料、FET の加工法や製造法などに関する知識領域が存在した。以上より、FET の分野には材料、用途、加工法、製造法、など多様な知識領域が存在し、その中でも材料または用途に関する知識領域が多くを占めることが明らかになった。

表 3.2 各知識領域の区分

区分	知識領域
材料知識領域	#1-1-1 酸化亜鉛ナノワイヤ、#1-1-2CNT、#1-2-2 ナノワイヤ、#1-2-3 ナノカーボン、#1-3-1 グラフェン、#1-3-2 二硫化モリブデン、#1-3-3 黒りん、#2-2-1 誘導体、#2-2-2 共役系高分子、#2-2-3 オリゴマー、#2-3-1P3HT、#2-3-2 共役系高分子、#3-1-1 歪みシリコン、#3-1-3 ヒ化インジウム、#3-3-2IGZO
用途知識領域	#1-1-3 トンネル FET、#1-2-1 イオン FET、#2-1-3 単結晶 FET、#2-3-3 発光 FET
その他知識領域	#2-1-1 接触抵抗、#2-1-2 ゲート絶縁体、#3-1-2 δ ドーピング、#3-2-1 二次元電子ガス、#3-2-2 電流コラプス、#3-2-3 不動態、#3-3-1 強誘電体、#3-3-3 溶液法

3.3.2.3. 知識領域の成熟度算出

各知識領域に含まれる論文数とその平均出版年を算出した。図 3.3 に各知識領域に含まれる論文数とその平均出版年を図示した。縦軸は各知識領域に含まれる論文の平均出版年、円の大きさは知識領域に含まれる論文数を表す。垂直線上に並ぶ円は同じサブクラスタから派生した知識領域を意味する。この結果から以下 2 つの傾向が見られた。

まず、同じサブクラスタから派生した知識領域の平均出版年は近くなる傾向がある。例えば、#1-3 グラフェン、#2-1 ペンタセンそれぞれから派生した知識領域の平均出版年の範囲は 2012.7~2014.5 年、2008.6~2011.1 年であった。しか

し、#3-1 シリコンから派生した知識領域の平均出版年の範囲は 1995.6~2005.5 年であり、派生した知識領域の平均出版年の範囲が広いサブクラスタも一部存在した。

次に、論文数が多い知識領域は平均出版年が古い傾向がある。例えば、#1-1CNT、#1-2 センサーFET、#1-3 グラフェン、#2-1 ペンタセン、#3-3 酸化亜鉛からそれぞれ派生する知識領域は論文数が多いものほど平均出版年が古い。論文数が多く平均出版年が古い知識領域は、他の知識領域よりも知識の蓄積が多く成長率が低いことを表している。したがって、それらの知識領域は成熟しており、今後大きく成長する可能性が低いことが推測できる。

論文数と平均出版年から各知識領域の成熟度を次のように評価した。#1-3-2 二硫化モリブデン、#1-3-3 黒りんは他の知識領域よりも平均出版年が新しく論文数が少ないため、未成熟であると判断した。一方、#1-1-1 酸化亜鉛ナノワイヤ、#1-2-1 イオン FET は平均出版年が古く論文数が多いため、成熟していると判断した。しかし、#2-2-2 共役系高分子や#2-2-3 オリゴマーのように論文数と平均出版年が比例していない(平均出版年は新しいが論文数が多い、あるいは、平均出版年は古いが論文数が少ない)ため成熟度の判断が難しい知識領域も一部存在していた。

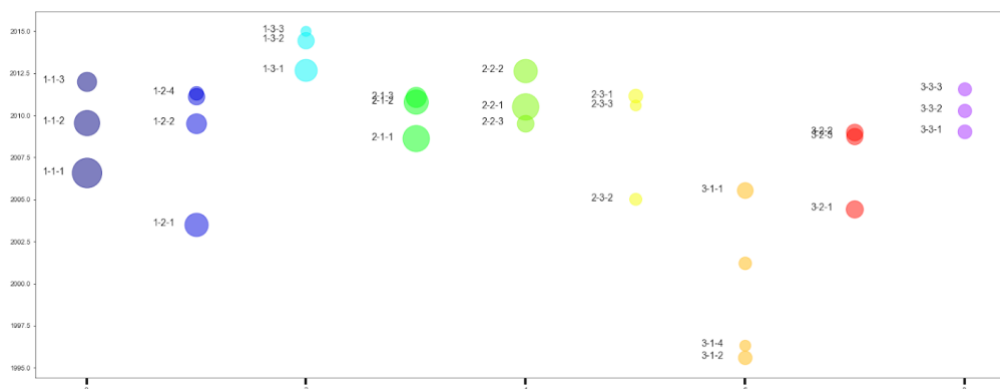


図 3.3 各知識領域の論文数と平均出版年の関係

知識領域の論文数と平均出版年には大まかな相関関係があるため、大半の知識領域については論文数と平均出版年からその成熟度を推測することができた。しかし、上記で述べたように論文数と平均出版年が比例しない知識領域も一部見られた。それゆえ、正確に知識領域の成熟度を見積もるためには論文数と平均

出版年を独立させて考慮する必要がある。

提案手法では、3.2.6 で述べた論文数と平均出版年の 2 軸から成るマトリクスを用いて知識領域の成熟度を「未成熟・成長」と「成熟」の 2 区分に分類した(表 3.3)。以下、各区分に分類された知識領域をそれぞれ「未成熟・成長知識領域」、「成熟知識領域」と称する。マトリクスの分類の結果、未成熟・成長知識領域には#1-3-2 二硫化モリブデン、#1-3-3 黒りん、#2-3-1P3HT、#3-3-3 溶液法が分類された。

表 3.3 各知識領域の成熟度

区分	エリア	知識領域
成熟知識領域	Aa	#1-2-1 イオン FET、#3-2-1 二次元電子ガス
	Ab	#2-3-2 共役系高分子、#3-1-1 歪みシリコン、#3-1-2 δ ドーピング、#3-1-3 ヒ化インジウム
	Ba	#1-1-1 酸化亜鉛ナノワイヤ、#1-1-2CNT、#1-2-2 ナノワイヤ、#2-1-1 接触抵抗、#2-1-2 ゲート絶縁体、#2-1-3 単結晶 FET、#2-2-1 誘導体、#2-2-3 オリゴマー、#3-2-2 電流コラプス
	Bb	#1-2-3 ナノカーボン、#2-3-3 発光 FET、#3-2-3 不動態、#3-3-1 強誘電体、#3-3-2IGZO
	Ca	#1-1-3 トンネル FET、#1-3-1 グラフェン、#2-2-2 共役系高分子
未成熟・成長知識領域	Cb	#1-3-2 二硫化モリブデン、#1-3-3 黒りん、#2-3-1P3HT、#3-3-3 溶液法

各知識領域の商業化のスピードを分析するために、各知識領域の論文抽出時から 2 年間 (2016/6/27~2018/6/26)の特許の増加率を算出した。論文抽出時と 2 年後の特許数(以下それぞれを“A”、“B”と称する)を数え、特許の増加率($\frac{B-A}{A}$)を算出した(表 3.4)。特許の検索には WIPO が運営する国内・国際特許データベースを用いた(WIPO)。なお、その際に設定した各知識領域の検索語は付録の表 A.2 に記載した。

未成熟・成長知識領域である#1-3-2 二硫化モリブデンと#1-3-3 黒りんが最も高い特許の増加率(それぞれ 100.0%、94.1%)を示した。特許は論文で公開された新規知識の商業化を主な目的としているため、高い特許の増加率は知識領域の商業化が急速に進んでいることを表している。したがって、提案手法で定義した

マトリクスを用いて急速に商業化が進んでいる知識領域を特定することに成功した。

表 3.4 各知識領域の特許数とその増加率

区分	知識領域	A	B	$\frac{B-A}{B}$ [%]	区分	知識領域	A	B	$\frac{B-A}{B}$ [%]	
成熟知識領域	#1-1-1	367	480	23.5	成熟知識領域	#2-2-3	388	436	11.0	
	#1-2-1	207	227	8.8		#3-2-2	#3-2-3	616	719	14.3
	#2-3-2	128	152	15.8						
	#2-3-3	966	1147	15.8		#3-3-1	438	498	12.0	
	#3-1-1	375	415	9.6		#1-1-3				
	#3-1-2	82	86	4.7		#1-3-1	1270	1594	20.3	
	#1-1-2	317	353	10.2	#2-2-2					
	#1-2-2	1087	1188	8.5	未成	#1-3-2	0	6	100.0	
	#2-1-1	28	40	30.0	熟・成長知識領域	#1-3-3	1	17	94.1	
	#2-1-2	13	13	0.0		#2-3-1	12	18	33.3	
	#2-1-3	501	531	5.6		#3-3-3	209	227	7.9	
	#1-2-3	259	356	27.2						

3.3.2.4. 知識領域間の関与性分析

2010年、2016年各時点での知識領域間のコサイン類似度を算出した(表 3.5)。コサイン類似度が高い知識領域間はそれらが何らかの関係を持つことを示している。例えば、高いコサイン類似度を示す#3-3-2IGZOと#3-3-3溶液法は材料と製造法という関係を持つ。

成熟知識領域のコサイン類似度は2010年と2016年の間で大差がない一方、一部の未成熟・成長知識領域のコサイン類似度は大きな差が見られた。例えば、#1-3-3黒りんのコサイン類似度の範囲は2010年では0.07~0.12であったが、2016年には0.25~0.44にまで大幅に増加した。したがって、知識領域が登場した直後に知識領域との関係は形成されることが読み取れた。そのため、FETの分野では未成熟・成長知識領域のみが新しく他の知識領域と複合していたことが読み取れた。

表 3.5 各知識領域間のコサイン類似度

発行年 (論文数)		~2010 (16337)																											
区分	知識領域 (赤字:成長知識領域)	材料知識領域														用途知識領域				その他知識領域									
		#1-1-1	#1-1-2	#1-2-2	#1-2-3	#1-3-1	#1-3-2	#1-3-3	#2-2-1	#2-2-2	#2-2-3	#2-3-1	#2-3-2	#3-1-1	#3-1-3	#3-3-2	#1-1-3	#1-2-1	#2-1-3	#2-3-3	#2-1-1	#2-1-2	#3-1-2	#3-2-1	#3-2-2	#3-2-3	#3-3-1	#3-3-3	
材料知識領域	#1-1-1酸化亜鉛ナノワイヤ	0.42	0.39	0.31	0.35	0.16	0.09	0.28	0.22	0.27	0.27	0.30	0.37	0.34	0.31	0.38	0.27	0.34	0.27	0.37	0.31	0.35	0.36	0.33	0.34	0.32	0.30		
	#1-1-2CNT	0.42	0.37	0.38	0.38	0.15	0.10	0.30	0.24	0.29	0.29	0.32	0.33	0.31	0.30	0.35	0.28	0.35	0.29	0.38	0.33	0.31	0.33	0.31	0.32	0.32	0.30		
	#1-2-2ナノワイヤ	0.39	0.37	0.38	0.33	0.16	0.09	0.26	0.21	0.25	0.26	0.29	0.35	0.32	0.29	0.35	0.33	0.32	0.25	0.34	0.29	0.32	0.31	0.33	0.33	0.29	0.27		
	#1-2-3ナノカーボン	0.31	0.38	0.38	0.33	0.14	0.08	0.28	0.23	0.27	0.26	0.30	0.25	0.25	0.25	0.27	0.34	0.30	0.25	0.30	0.28	0.24	0.26	0.25	0.26	0.27	0.27		
	#1-3-1グラフェン	0.35	0.38	0.33	0.33	0.18	0.12	0.28	0.24	0.28	0.29	0.31	0.31	0.31	0.31	0.35	0.24	0.34	0.29	0.35	0.31	0.31	0.32	0.32	0.31	0.32	0.30		
	#1-3-2二硫化モリブデン	0.16	0.15	0.16	0.14	0.18	0.07	0.07	0.14	0.13	0.14	0.17	0.16	0.17	0.15	0.18	0.17	0.10	0.16	0.16	0.15	0.15	0.15	0.14	0.15	0.18	0.17	0.19	
	#1-3-3黒りん	0.09	0.10	0.09	0.08	0.12	0.07	0.07	0.06	0.07	0.08	0.08	0.08	0.08	0.09	0.10	0.11	0.06	0.09	0.09	0.09	0.08	0.10	0.09	0.10	0.09	0.10	0.10	
	#2-2-1誘導体	0.28	0.30	0.26	0.28	0.28	0.14	0.07	0.38	0.45	0.36	0.39	0.24	0.23	0.24	0.24	0.24	0.24	0.36	0.34	0.40	0.33	0.23	0.25	0.23	0.24	0.26	0.28	
	#2-2-2共役系高分子	0.22	0.24	0.21	0.23	0.24	0.13	0.06	0.38	0.41	0.37	0.36	0.19	0.20	0.22	0.19	0.19	0.30	0.32	0.31	0.28	0.20	0.21	0.19	0.21	0.22	0.25	0.25	
	#2-2-3オリゴマー	0.27	0.29	0.25	0.27	0.28	0.14	0.07	0.45	0.41	0.38	0.42	0.23	0.22	0.24	0.22	0.24	0.34	0.34	0.36	0.31	0.23	0.24	0.23	0.23	0.25	0.27	0.27	
	#2-3-1P3HT	0.27	0.29	0.26	0.26	0.29	0.17	0.08	0.36	0.37	0.38	0.42	0.25	0.24	0.27	0.24	0.23	0.37	0.32	0.37	0.34	0.24	0.26	0.24	0.26	0.27	0.32	0.32	
	#2-3-2共役系高分子	0.30	0.32	0.29	0.30	0.31	0.16	0.08	0.39	0.36	0.42	0.42	0.26	0.26	0.28	0.25	0.26	0.38	0.35	0.40	0.34	0.27	0.28	0.26	0.27	0.30	0.31	0.31	
	#3-1-1窒みシリコン	0.37	0.33	0.35	0.25	0.31	0.17	0.08	0.24	0.19	0.23	0.25	0.26	0.36	0.30	0.37	0.24	0.30	0.24	0.32	0.27	0.37	0.36	0.34	0.37	0.29	0.27	0.27	
#3-1-3ヒ化インジウム	0.34	0.31	0.32	0.25	0.31	0.15	0.09	0.23	0.20	0.22	0.24	0.26	0.36	0.30	0.35	0.23	0.28	0.25	0.30	0.25	0.45	0.38	0.40	0.36	0.28	0.25	0.25		
#3-3-2IGZO	0.31	0.30	0.29	0.25	0.31	0.18	0.10	0.24	0.22	0.24	0.27	0.28	0.30	0.30	0.33	0.22	0.32	0.28	0.34	0.32	0.30	0.30	0.32	0.34	0.31	0.41	0.41		
用途知識領域	#1-1-3トンネルFET	0.38	0.35	0.35	0.27	0.35	0.17	0.11	0.24	0.19	0.22	0.24	0.25	0.37	0.35	0.33	0.23	0.30	0.25	0.31	0.27	0.35	0.31	0.33	0.33	0.29	0.28		
	#1-2-1イオンFET	0.27	0.28	0.33	0.34	0.24	0.10	0.06	0.24	0.19	0.24	0.23	0.26	0.24	0.23	0.22	0.23	0.26	0.21	0.28	0.26	0.22	0.25	0.24	0.25	0.23	0.23		
	#2-1-3単結晶FET	0.34	0.35	0.32	0.30	0.34	0.16	0.09	0.36	0.30	0.34	0.37	0.38	0.30	0.28	0.32	0.30	0.26	0.36	0.46	0.41	0.28	0.30	0.29	0.30	0.34	0.35		
その他知識領域	#2-3-3発光FET	0.27	0.29	0.25	0.25	0.29	0.16	0.09	0.34	0.32	0.34	0.32	0.35	0.24	0.25	0.28	0.25	0.21	0.36	0.36	0.32	0.25	0.25	0.25	0.28	0.29	0.29		
	#2-1-1接触抵抗	0.37	0.38	0.34	0.30	0.35	0.15	0.09	0.40	0.31	0.36	0.37	0.40	0.32	0.30	0.34	0.31	0.28	0.46	0.36	0.43	0.31	0.33	0.32	0.33	0.33	0.33		
	#2-1-2ゲート絶縁体	0.31	0.33	0.29	0.28	0.31	0.15	0.08	0.33	0.28	0.31	0.34	0.34	0.27	0.25	0.32	0.27	0.26	0.41	0.32	0.43	0.25	0.28	0.27	0.31	0.32	0.33		
	#3-1-26ドープ	0.35	0.31	0.32	0.24	0.31	0.15	0.10	0.23	0.20	0.23	0.24	0.27	0.37	0.45	0.30	0.35	0.22	0.28	0.25	0.31	0.25	0.42	0.38	0.35	0.29	0.26		
	#3-2-1二次元電子ガス	0.36	0.33	0.31	0.26	0.32	0.14	0.09	0.25	0.21	0.24	0.26	0.28	0.36	0.38	0.30	0.31	0.25	0.30	0.25	0.33	0.28	0.42	0.46	0.41	0.31	0.27		
	#3-2-2電流コラプス	0.33	0.31	0.33	0.25	0.32	0.15	0.10	0.23	0.19	0.23	0.24	0.26	0.34	0.40	0.32	0.33	0.24	0.29	0.25	0.32	0.27	0.38	0.46	0.43	0.29	0.27		
	#3-2-3不動態	0.34	0.32	0.33	0.26	0.31	0.18	0.09	0.24	0.21	0.23	0.26	0.27	0.37	0.36	0.34	0.33	0.25	0.30	0.25	0.33	0.31	0.35	0.41	0.43	0.32	0.30		
	#3-3-1強誘電体	0.32	0.32	0.29	0.27	0.32	0.17	0.10	0.26	0.22	0.25	0.27	0.30	0.29	0.28	0.31	0.29	0.23	0.34	0.28	0.33	0.32	0.29	0.31	0.29	0.32	0.31		
	#3-3-3溶液法	0.30	0.30	0.27	0.27	0.30	0.19	0.10	0.28	0.25	0.27	0.32	0.31	0.27	0.25	0.41	0.28	0.23	0.35	0.29	0.33	0.33	0.26	0.27	0.27	0.30	0.31		
	発行年 (論文数)		~2016 (33371)																										
区分	知識領域 (赤字:成長知識領域)	材料知識領域														用途知識領域				その他知識領域									
		#1-1-1	#1-1-2	#1-2-2	#1-2-3	#1-3-1	#1-3-2	#1-3-3	#2-2-1	#2-2-2	#2-2-3	#2-3-1	#2-3-2	#3-1-1	#3-1-3	#3-3-2	#1-1-3	#1-2-1	#2-1-3	#2-3-3	#2-1-1	#2-1-2	#3-1-2	#3-2-1	#3-2-2	#3-2-3	#3-3-1	#3-3-3	
材料知識領域	#1-1-1酸化亜鉛ナノワイヤ	0.43	0.40	0.33	0.42	0.40	0.34	0.29	0.26	0.28	0.31	0.31	0.38	0.35	0.33	0.40	0.29	0.36	0.29	0.38	0.33	0.34	0.37	0.35	0.36	0.35	0.34		
	#1-1-2CNT	0.43	0.38	0.39	0.44	0.40	0.35	0.31	0.28	0.30	0.33	0.33	0.34	0.32	0.33	0.38	0.31	0.38	0.32	0.40	0.36	0.31	0.33	0.33	0.34	0.35	0.35		
	#1-2-2ナノワイヤ	0.40	0.38	0.44	0.38	0.35	0.31	0.27	0.25	0.27	0.30	0.30	0.35	0.32	0.31	0.38	0.34	0.34	0.28	0.35	0.32	0.30	0.31	0.33	0.33	0.31	0.31		
	#1-2-3ナノカーボン	0.33	0.39	0.44	0.39	0.35	0.31	0.28	0.26	0.29	0.31	0.32	0.27	0.26	0.27	0.28	0.40	0.33	0.29	0.32	0.31	0.25	0.27	0.27	0.27	0.31	0.31		
	#1-3-1グラフェン	0.42	0.44	0.38	0.39	0.45	0.39	0.32	0.29	0.31	0.34	0.35	0.34	0.32	0.34	0.37	0.30	0.40	0.33	0.40	0.38	0.32	0.35	0.34	0.35	0.37	0.36		
	#1-3-2二硫化モリブデン	0.40	0.40	0.35	0.35	0.45	0.44	0.30	0.28	0.30	0.33	0.33	0.34	0.31	0.34	0.35	0.28	0.37	0.32	0.38	0.35	0.31	0.34	0.33	0.34	0.38	0.36		
	#1-3-3黒りん	0.34	0.35	0.31	0.31	0.39	0.44	0.28	0.26	0.28	0.31	0.32	0.31	0.30	0.30	0.32	0.25	0.33	0.31	0.32	0.29	0.29	0.32	0.29	0.30	0.34	0.31		
	#2-2-1誘導体	0.29	0.31	0.27	0.28	0.32	0.30	0.28	0.44	0.47	0.38	0.39	0.24	0.23	0.25	0.23	0.25	0.38	0.36	0.39	0.35	0.23	0.24	0.23	0.24	0.28	0.29		
	#2-2-2共役系高分子	0.26	0.28	0.25	0.26	0.29	0.28	0.26	0.44	0.44	0.40	0.39	0.22	0.21	0.24	0.22	0.23	0.35	0.34	0.35	0.33	0.21	0.23	0.22	0.23	0.26	0.29		
	#2-2-3オリゴマー	0.28	0.30	0.27	0.29	0.31	0.30	0.28	0.47	0.44	0.40	0.42	0.24	0.23	0.25	0.23	0.25	0.36	0.38	0.36	0.33	0.23	0.25	0.23	0.24	0.28	0.30		
	#2-3-1P3HT	0.31	0.33	0.30	0.31	0.34	0.33	0.31	0.38	0.40	0.40	0.45	0.28	0.25	0.29	0.26	0.27	0.42	0.36	0.40	0.37	0.26	0.28	0.26	0.27	0.32	0.34		
	#2-3-2共役系高分子	0.31	0.33	0.30	0.32	0.35	0.33	0.32	0.39	0.39	0.42	0.45	0.28	0.27	0.30	0.26	0.28	0.40	0.39	0.41	0.37	0.28	0.30	0.27	0.28	0.33	0.34		
	#3-1-1窒みシリコン	0.38	0.34	0.35	0.27	0.34	0.34	0.31	0.24	0.22	0.24	0.28	0.28	0.38	0.33	0.39	0.26	0.31	0.27	0.33	0.28	0.38	0.36	0.39	0.31	0.31	0.31		
#3-1-3ヒ化インジウム	0.35	0.32	0.32	0.26	0.32	0.31	0.30	0.23	0.21	0.23	0.25	0.27	0.38	0.32	0.37	0.25	0.29	0.28	0.31	0.26	0.45	0.40	0.41	0.38	0.30	0.28			
#3-3-2IGZO	0.33	0.33	0.31	0.27	0.34	0.34	0.30	0.25	0.24	0.25	0.29	0.30	0.33	0.32	0.34	0.26	0.34	0.30	0.37	0.34	0.31	0.33	0.35	0.38	0.35	0.47			
用途知識領域	#1-1-3トンネルFET	0.40	0.38	0.36	0.28	0.37	0.35	0.32	0.23	0.22	0.23	0.26	0.26	0.39	0.37	0.34	0.25	0.31	0.27	0.33	0.29	0.35	0.34	0.35	0.35	0.32	0.30		
	#1-2-1イオンFET	0.29	0.31	0.38	0.40	0.30	0.28	0.25	0.25	0.23	0.25	0.27	0.28	0.26	0.25	0.26	0.25	0.29	0.25	0.30	0.28	0.24	0.27	0.26	0.27	0.28	0.28		
	#2-1-3単結晶FET	0.36	0.38	0.34	0.																								

リカ・韓国は高い値(それぞれ 12.8%、13.1%、12.5%)、日本は低い値(6.9%)を示した。この値は未成熟・成長知識領域の研究活動の集中度合いと比例するため、**各国の研究活動方針は大きく異なっていることが示唆できる**。ここでは各国の研究活動方針が異なる背景の 1 つに各国の政策活動があると考え、各国の FET に関する政策活動を比較した。以下にアメリカ・中国・韓国・日本の政策活動を例示する(JST, 2019)。

アメリカは二次元半導体の開発強化に取り組んでおり、二次元半導体に関する研究プロジェクトを他国よりも早く打ち出していた。例えば、Debut of Graphene based conductive ink(2009)、2D Materials and Devices beyond Graphene(2015~2017)、Two-Dimensional Crystal Consortium Materials Innovation Platform(2016~2021)などが実際に立ち上げられた。

中国ではグラフェンに重点を置いている。20 拠点以上のグラフェン産業パークが建設中もしくは建設済みであり、グラフェン産業インフラの拡充が急速に進んでいる。また、グラフェン研究における産学連携の促進に向けて企業と研究機関が連携してグラフェンの商業化を目指す研究共同組合 China Innovation Alliance of the Graphene Industry(CGIA)が 2013 年に設立された。さらに、中国は産業活動だけではなく研究活動においても大きな躍進を遂げており、近年グラフェンに関する論文と特許の出版数はいずれも中国がトップである(Ahn, 2015; Zhao, 2018)。

韓国も中国と同様にグラフェンに力を入れており、例えば、Graphene Hub Project(2012~2017)、Graphene Commercialization Technology Map(2012)などグラフェンに関する研究プロジェクトが多数打ち出された。また、2014 年のグラフェンの商業化促進に向けた技術政策の制定や、Samsung Electronics 社によるグラフェンをバッテリーに用いたスマートフォンの発表など(Villas-Boas, 2019)、グラフェンの商業化においても近年大きな動きが見られている。一方、日本の二次元半導体に関する取り組みは他国より遅れを取っている。2013 年頃からようやく日本でも国際規模の研究プロジェクトが充実し始め、科学研究費補助金: 原子層(2013~2017)、低炭素社会を実現するナノ炭素材料実用化プロジェクト(2014~2016)などが打ち出された(NEDO, 2018)。この遅れの理由の 1 つに、日本が有機エレクトロニクスにも継続的に注力している点がある。実際に、有機材料を基礎とした新規エレクトロニクス技術の開発(2009~2019)など有機エレクトロニクスに関する研究プロジェクトが近年も打ち出されている。ノ

ーベル化学賞を受賞した白川英樹の導電性ポリマーの発見以降、日本の研究活動では機能性ポリマーが盛んになり、その影響が現在も継続していることが考えられる(Shirakawa, 1977)。

以上より、未成熟・成長知識領域に属する論文の割合が高いアメリカ・中国・韓国は二次元半導体の強化に重点的に取り組んでいる一方、日本では継続的に有機半導体にも力を入れており、近年ようやく二次元半導体の強化に着手したことが読み取れた。したがって、未成熟・成長知識領域に属する論文の比率(表 3.6)に反各国の研究活動方針を映させることができた。

表 3.6 各国の出版論文のうち未成熟・成長知識領域に属する数とその比率

国	論文出版数		未成熟・成長知識領域 に属する論文の割合
	全体	未成熟・成長知識領域	
全体	30641	3070	10.0%
アメリカ	7668	985	12.8%
中国	5072	665	13.1%
韓国	4321	540	12.5%
日本	3478	240	6.9%

次に、各国の研究力の分配方針を比較した。その際に各未成熟・成長知識領域の被引用数上位 100 論文合計 400 本(以下、“High Impact Paper(HIP)”と称する)と論文出版数上位 4 カ国(アメリカ・中国・韓国・日本)を分析対象とし、以下 2 つの指標を用いて HIP 出版数の分散を算出した。

1 つ目の指標は研究機関間の分散である。各国の HIP 出版数を研究機関ごとに数え、研究機関間の変動係数を算出した(表 3.7)。

表 3.8 には各国の HIP 出版数上位 5 研究機関を記載した(なお、付録の

表 A.3にHIPを出版した全ての研究機関を記載した)。この結果から各国のHIP出版数が一部の研究機関に一極集中している、あるいは、多くの研究機関に分散しているかを調査した。アメリカ・中国・韓国・日本の研究機関間の変動係数はそれぞれ1.066、1.123、1.149、0.822であり大差がないため、分散は同程度であると判断した。

また、Times Higher Education(THE)の2016年度の大学ランキングとHIP出版数の相関性を調査した(THE, 2016)。各国のHIP出版数上位の研究機関に着目すると、アメリカ・韓国・日本では大学ランキングが高い研究機関が多くを占めており、大学ランキングとHIP出版数の相関性が見られた。具体的には、アメリカ・韓国・日本の各国のHIP出版数1位の研究機関はそれぞれNorthwestern University(NU)(25位)、Pohang University of Science and Technology(116位)、The University of Tokyo(43位)、といずれも大学ランキング上位の研究機関であった。一方、中国のHIP出版数1位、2位の研究機関はそれぞれMinistry of Education(MOE)、Chinese Academy of Sciences(CAS)であり、大学ランキング上位であるPeking University(42位)やTsinghua University(TU)(47位)よりも多くのHIPを出版していた。MOE、CASは行政との関連が強い研究機関であり、他国のHIP出版数上位の研究機関とは異なる特色を持つ。したがって、大学ランキングとHIP出版数の相関性は中国では他国とは異なる傾向が見られた。

2つ目の指標は知識領域間の分散である。各国のHIP出版数を知識領域ごとに数え(表 3.9)、知識領域間の変動係数を算出した(表 3.7)。この結果から各国のHIP出版数が一部の知識領域に集中している、あるいは、幅広い知識領域に分散しているかを調査した。アメリカ・中国・韓国・日本の各国の知識領域間の変動係数はそれぞれ0.258、0.828、0.611、0.282であり、アメリカと日本が低い値、中国と韓国が高い値を示した。したがって、アメリカと日本は幅広い知識領域にHIP出版数が分散している一方、中国と韓国は一部の知識領域にHIP出版数が集中していることが示された。実際に、アメリカのHIP出版数上位3大学(Northwestern University(NU), Massachusetts Institute of Technology(MIT), Stanford University(SU))が最も多く出版しているHIPの知識領域は異なっており、NUは#1-3-3黒りん、MITは#1-3-2二硫化モリブデン、SUは#2-3-1P3HTで最も多くのHIPを出版していた。これに対して、中国のHIP出版数上位の研究機関(MOE, CAS, PU)が最も多く出版する知識領域はいずれも#1-3-3黒りん

であり、中国では研究活動が一部の知識領域に集中する傾向が読み取れた。

表 3.7 各国の知識領域・研究機関における HIP 出版数の変動係数

国	変動係数	
	研究機関	知識領域
アメリカ	1.066	0.258
中国	1.123	0.828
韓国	1.149	0.611
日本	0.822	0.282

表 3.8 各国の HIP 出版数上位 5 研究機関

国	出版数	機関 (大学ランキング順位) 赤文字: 上位 100 研究機関
アメリカ	25	Northwestern University (25)
	19	National Institute of Standards and Technology
	18	Massachusetts Institute of Technology (5)
	14	Stanford University (3)
	11	Purdue University (113)
中国	13	Ministry of Education
	11	Chinese Academy of Sciences
	7	Peking University (42)
	6	Tsinghua University (47)
	5	University of Science and Technology of China (201-250)
韓国	15	Pohang University of Science and Technology (116), Yonsei University (301-350)
	9	Korea Research Institute of Chemical Technology
	8	Sungkyunkwan University (153)
	5	Electronics and Telecommunications Research Institute, Samsung Advanced Institute of Technology
日本	9	The University of Tokyo (43)
	6	National Institute for Materials Science
	4	RIKEN, Japan Science and Technology Agency
	3	Tohoku University (201-250), Waseda University (601-800)

表 3.9 各国の知識領域別 HIP 出版数

国	知識領域			
	#1-3-2	#1-3-3	#2-3-1	#3-3-3
アメリカ	72	51	52	34
中国	9	30	3	8
韓国	9	3	11	22
日本	6	7	5	3

3.3.3.EDLC

本節では、3.2 で説明した手法で EDLC 分野を分析した結果を述べる。

3.3.3.1. 分析対象分野の概要

EDLC とはコンデンサの 1 種で、電極と電解液の界面に形成される電気二重層を利用して蓄電・放電を行う電子部品である。EDLC は他のコンデンサと比較して蓄電量の高さや長寿命といった特長を持ち、スマートフォンやゲーム機などの小型製品から乗用車や街路灯などの大型製品まで幅広い製品に搭載されている。

初期の EDLC は 1957 年に開発された多孔質炭素電極を用いたコンデンサとされている(Becker, 1957)。その後、電解コンデンサと電気化学コンデンサを組み合わせたハイブリッドコンデンサや(Evans, 1994; Evans, 1994)、静電カーボン電極とリチウムイオン電極を組み合わせたリチウムイオンコンデンサなど、電極材料の開発を軸に EDLC の性能は向上されてきた (FDK, 2015)。今後も新しい電極材料を用いた高性能な EDLC が開発されることが予測されている(Harrop, 2020)。

3.3.3.2. 知識領域の抽出とラベリング

検索語を“supercapacit* OR “electrical double layer capacit*” OR edlc OR ultracapacit*” (*はワイルドカード)に設定し、タイトル、アブストラクト、キーワードのいずれかに設定した検索語が含まれる論文を抽出した。抽出した論文の引用ネットワークを作成し、十分に細かい知識領域を得るために 3 回クラスタリングを行った。

① クラスタリング 1 回目

抽出した論文のうち最大連結部に含まれる割合は約 96%(35068 本中 33750 本)であった。この最大連結部のクラスタリングの結果 76 個のクラスタが得られ、それぞれに含まれる論文数は降順に 12652、12161、7683、670...2 であった。以下、論文数が a 番目に大きいクラスタを“#a”と称する。これらのクラスタのうち提案手法では論文数が多い#1, #2, #3 を分析対象とした。

② クラスタリング 2 回目

#1~3 を再度クラスタリングし、より細かいクラスタ(サブクラスタ)を得た。以下、クラスタ#a から派生したサブクラスタのうち b 番目に論文数が多いものを“#a-b”と称する。提案手法では論文数が多い#1-1~3, #2-1~3, #3-1~3 を分析対象とした。

③ クラスタリング 3 回目

#1-1~3, #2-1~3, #3-1~3 を再度クラスタリングし、より細かいクラスタ(サブサブクラスタ)を得た。以下、サブクラスタ#a-b から派生したサブサブクラスタのうち c 番目に論文数が多いものを“#a-b-c”、サブサブクラスタを「知識領域」と称する。提案手法では、得られたサブサブクラスタのうち論文数が多い#1-1-1~3, #1-2-1~3, #1-3-1~3, #2-1-1~3, #2-2-1~4, #2-3-1~3, #3-1-1~3, #3-2-1~3, #3-3-1~3 を分析対象とした。

表 3.10 に示す各知識領域の特徴語をもとにそれぞれ#1-1-1 活性炭素、#1-1-2 二酸化マンガン-炭素(MnO₂-C)、#1-1-3 高分子電解質-活性炭素、#1-2-1 窒素ドーピング多孔質炭素、#1-2-2 バイオマス炭素、#1-2-3 エレクトロスピング法カーボンナノファイバー(ECNF)、#1-3-1 用途開発、#1-3-2 細孔、#1-3-3 電解質、#2-1-1 窒素ドーピンググラフェン、#2-1-2 ポリアニリン-グラフェン(PANi-G)、#2-1-3 酸化グラフェン-CNT(GO-CNT)、#2-2-1 フレキシブルキャパシタ、#2-2-2 マイクロキャパシタ、#2-2-3 着用キャパシタ、#2-2-4 酸化鉄、#2-3-1 ポリピロール、#2-3-2 PANi-CNT、#2-3-3 二硫化モリブデン、#3-1-1 MnO₂・TiO₂ ナノチューブ(MnO₂・TiO₂NT)、#3-1-2 酸化ニッケルコバルト、#3-1-3 コバルト系複水酸化物、#3-2-1 酸化ニッケル、#3-2-2 酸化バナジウム、#3-2-3 層状複水酸化物、#3-3-1 有機金属構造体(MOF)、#3-3-2 硫化金属、#3-3-3 ニッケルコバルト硫化物、

と名付けた。なお、各知識領域の上位 10 TF-IDF の特徴語は付録の表 A.4 に記載した。

表 3.10 各知識領域の特徴語

知識領域	単語	TF-IDF	知識領域	単語	TF-IDF	知識領域	単語	TF-IDF
#1-1-1	carbon	0.00266	#1-3-2	size	0.00248	#3-1-1	mno2	0.00534
	activated	0.00232	#1-3-3	ionic liquid	0.00297		tio2	0.00421
#1-1-2	mno2	0.00654	#2-1-1	nitrogen	0.00231	#3-1-2	nico2o4	0.00644
	composite	0.00215		doped graphene	0.00156	znco2o4	0.00411	
#1-1-3	polymer electrolyte	0.00714	#2-1-2	pani	0.00397	#3-1-3	mnco2o4	0.00347
#1-2-1	nitrogen doped	0.00192		composite	0.00245		cuco2o4	0.00273
#1-2-2	activated carbon	0.00169	#2-1-3	carbon nanotube	0.00212		cofe2o4	0.00196
	derived	0.00160	#2-2-1	paper	0.00213	#3-2-1	nio	0.00607
	lignin	0.00154		flexible	0.00200	#3-2-2	v2o5	0.00419
#1-2-3	carbon nanofibers	0.00176	#2-2-2	micro supercapacitors	0.00233	#3-2-3	Ldh	0.00534
	electrospinning	0.00149	#2-2-3	wearable	0.00243	#3-3-1	metal organic	0.00229
#1-3-1	battery	0.00319	#2-2-4	fe2o3	0.00403		mofs	0.00167
	vehicle	0.00313	#2-3-1	polypyrrole	0.00243	#3-3-2	ni3s2	0.00301
	storage system	0.00257	#2-3-2	pani	0.00630		co9s8	0.00147
#1-3-2	pore	0.00376	#2-3-3	mos2	0.01304	#3-3-3	nico2s4	0.00730

特徴語をもとに各知識領域を「複合材料知識領域」、「単体材料知識領域」、「用途知識領域」、いずれにも分類されない「その他知識領域」の 4 つの区分に分類した(表 3.11)。複合材料知識領域、単体材料知識領域、用途知識領域、その他知識領域にはそれぞれ 5 個、17 個、4 個、2 個の知識領域が分類された。複合材料知識領域には、#1-1-2MnO₂-C、#1-1-3 高分子電解質-活性炭素、#2-1-2PANi-G、

#2-1-3GO-CNT、#2-3-2PANi-CNT が分類された。単体材料知識領域には、#1-1-1 活性炭素、#1-2-1 窒素ドーピング多孔質炭素、#1-2-2 バイオマス炭素、#1-2-3ECNF、#2-1-1 窒素ドーピンググラフェン、#2-3-1 ポリピロール、#2-3-3 二硫化モリブデン、#3-1-1MnO₂・TiO₂NT、#3-1-2 酸化ニッケルコバルト、#3-1-3 コバルト系複水酸化物、#3-2-1 酸化ニッケル、#3-2-2 酸化バナジウム、#3-2-3 層状複水酸化物、#3-3-1MOF、#3-3-2 硫化金属、#3-3-3 ニッケルコバルト硫化物が分類された。用途知識領域には、#1-3-1 用途開発、#2-2-1 フレキシブルキャパシタ、#2-2-2 マイクロキャパシタ、#2-2-3 着用キャパシタ、#2-2-4 酸化鉄が分類された。その他知識領域には、#1-3-2 細孔、#1-3-3 電解質が分類された。

複合材料知識領域に着目すると、PANi-G や GO-CNT などカーボン材料を含む複合材料に関する知識領域が多く見られた。単体材料知識領域では、活性炭素や窒素ドーピンググラフェンなどのカーボン材料、または MnO₂ や TiO₂ などの金属材料に関する知識領域が多く存在した。用途知識領域では、着用者の動きを計測する着用キャパシタ、従来のキャパシタより小型なマイクロキャパシタなど多様な知識領域が見られた。その他材料知識領域には、電極材料の形状や電解質など材料開発とは異なるアプローチによる EDLC の性能向上に関する知識領域が見られた。

表 3.11 各知識領域の区分

区分	知識領域
複合材料 知識領域	#1-1-2MnO ₂ -C、#1-1-3 高分子電解質-活性炭素、#2-1-2PANi-G、#2-1-3GO-CNT、#2-3-2PANi-CNT
単体材料 知識領域	#1-1-1 活性炭素、#1-2-1 窒素ドーピング多孔質炭素、#1-2-2 バイオマス炭素、#1-2-3ECNF、#2-1-1 窒素ドーピンググラフェン、#2-2-4 酸化鉄、#2-3-1 ポリピロール、#2-3-3 二硫化モリブデン、#3-1-1MnO ₂ ・TiO ₂ NT、#3-1-2 酸化ニッケルコバルト、#3-1-3 コバルト系複水酸化物、#3-2-1 酸化ニッケル、#3-2-2 酸化バナジウム、#3-2-3 層状複水酸化物、#3-3-1MOF、#3-3-2 硫化金属、#3-3-3 ニッケルコバルト硫化物
用途 知識領域	#1-3-1 用途開発、#2-2-1 フレキシブルキャパシタ、#2-2-2 マイクロキャパシタ、#2-2-3 着用キャパシタ
その他 知識領域	#1-3-2 細孔、#1-3-3 電解質

3.3.3.3. 知識領域の成熟度算出

各知識領域に含まれる論文数とその平均出版年を算出した。図 3.4 に各知識領域に含まれる論文数とその平均出版年を図示した。縦軸は各知識領域に含まれる論文の平均出版年、円の大きさは知識領域に含まれる論文数を表す。垂直線上に並ぶ円は同じサブクラスタから派生した知識領域を意味する。この結果から以下 2 つの傾向が見られた。

まず、同じサブクラスタから派生した知識領域の平均出版年は近くなる傾向がある。例えば、#1-3 性能向上から派生した知識領域の平均出版年の範囲は 2013.6~2014.0 年であった。しかし、#2-3 導電性高分子から派生した知識領域の平均出版年の範囲は 2012.6~2016.5 年であり、派生した知識領域の平均出版年の範囲が広いサブクラスタも一部存在した。

次に、論文数が多い知識領域は平均出版年が古い傾向がある。例えば、#2-2 デバイス、#2-3 導電性高分子、#3-1 アレイ電極からそれぞれ派生する知識領域は論文数が多いものほど平均出版年が古い。論文数が多く平均出版年が古い知識領域は他の知識領域よりも知識の蓄積が多く成長率が低いことを表している。したがって、それらの知識領域は成熟しており、今後大きく成長する可能性が低いことが推測できる。

論文数と平均出版年から各知識領域の成熟度を次のように評価した。#2-3-3 二硫化モリブデン、#3-3-3 ニッケルコバルト硫化物は他の知識領域よりも平均出版年が新しく論文数が少ないため、未成熟であると判断した。一方、#1-1-1 活性炭素、#1-1-2MnO₂-C、#2-3-1 ポリピロールは平均出版年が古く論文数が多いため、成熟しているとみなした。しかし、#1-1-3 高分子電解質-活性炭素や#1-2-2 バイオマス炭素のように論文数と平均出版年が比例していない(平均出版年が新しいが論文数が多い、あるいは、平均出版年は古い論文数が少ない)ため成熟度の判断が難しい知識領域も一部存在していた。

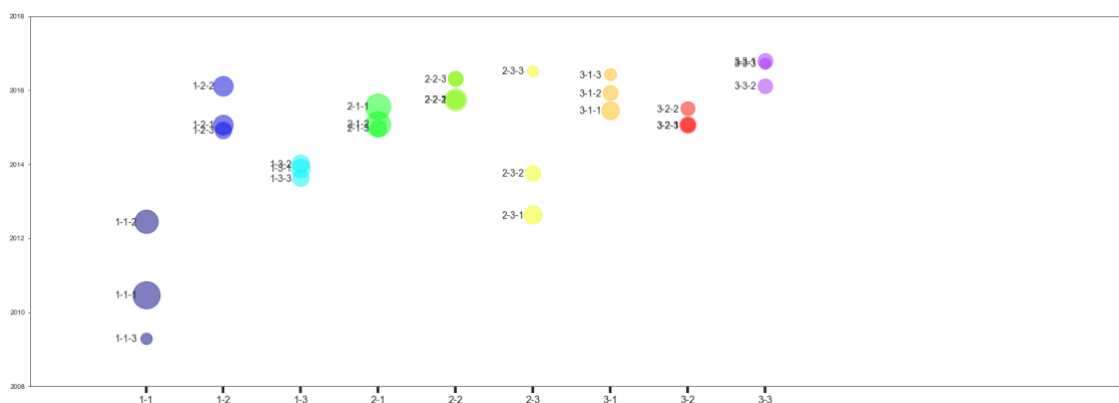


図 3.4 各知識領域の論文数と平均出版年の関係

知識領域の論文数と平均出版年には大まかな相関関係があるため、大半の知識領域は論文数と平均出版年からその成熟度を推測することができた。しかし、上記で述べたように論文数と平均出版年が比例しない知識領域も一部存在していた。それゆえ、正確に知識領域の成熟度を見積もるためには論文数と平均出版年を独立させて考慮する必要がある。

提案手法では、3.2.6 で述べた論文数と平均出版年の 2 軸から成るマトリクスを用いて知識領域の成熟度を「未成熟・成長」と「成熟」の 2 区分に分類した(表 3.12)。以下、各区分に分類された知識領域をそれぞれ「未成熟・成長知識領域」、「成熟知識領域」と称する。マトリクスの分類の結果、未成熟・成長知識領域には#2-2-3 着用キャパシタ、#2-2-4 酸化鉄、#2-3-3 二硫化モリブデン、#3-1-3 コバルト系複水酸化物、#3-3-1MOF、#3-3-3 ニッケルコバルト硫化物の 6 つが分類された。

表 3.12 各知識領域の成熟度

区分	エリア	知識領域
成熟知識領域	Aa	#1-1-1 活性炭素、#1-1-2MnO ₂ -C、#1-3-1 用途開発、#2-3-1 ポリピロール
	Ab	#1-1-3 高分子電解質・活性炭素、#1-3-3 電解質、#2-3-2PANi-CNT
	Ba	#1-2-1 窒素ドーピング多孔質炭素、#1-2-3ECNF、#1-3-2 細孔、#2-1-1 窒素ドーピンググラフェン、#2-1-2PANi-G、#2-1-3GO-CNT、#2-2-1 フレキシブルキャパシタ、#2-2-2 マイクロキャパシタ、#3-1-1MnO ₂ NT・TiO ₂ NT
	Bb	#3-1-2 酸化ニッケルコバルト、#3-2-1 酸化ニッケル、#3-2-2 酸化バナジウム、#3-2-3 層状複水酸化物、#3-3-2 硫化金属
	Ca	#1-2-2 バイオマス炭素
未成熟・成長知識領域	Cb	#2-2-3 着床キャパシタ、#2-2-4 酸化鉄、#2-3-3 二硫化モリブデン、#3-1-3 コバルト系複水酸化物、#3-3-1 MOF、#3-3-3 ニッケルコバルト硫化物

各知識領域の商業化のスピードを分析するために、各知識領域の論文抽出時から2年間(2018/11/28~2020/11/27)の特許の増加率を算出した。論文抽出時と2年後の特許数(以下それぞれを“A”、“B”と称する)を数え、特許の増加率($\frac{B-A}{A}$)を算出した(表 3.13)。特許の検索にはWIPOが運営する国内・国際特許データベースを用いた(WIPO)。なお、その際に設定した各知識領域の検索語は付録の表A.5に記載した。

未成熟・成長知識領域である#3-3-1MOFが最も高い特許の増加率(75.0%)を示した。3.3.2.3で説明したように、これは知識領域の商業化が急速に進んでいることを表している。以上より、提案手法で定義したマトリクスで未成熟・成長知識領域を定義することで急速に商業化が進んでいる知識領域を特定することに成功した。

表 3.13 各知識領域の特許数とその増加率

区分	知識領域	A	B	$\frac{B-A}{B}$ [%]	区分	知識領域	A	B	$\frac{B-A}{B}$ [%]
成熟知識領域	#1-1-1	53	93	43.0	成熟知識領域	#2-3-1	22	43	48.8
	#1-1-2	55	58	5.2		#2-3-2	19	33	42.4
	#1-1-3	9	19	52.6		#3-1-1	63	100	37.0
	#1-2-1	2	3	33.3		#3-1-2	31	48	35.4
	#1-2-2	4	4	0.0		#3-2-1	228	384	40.6
	#1-2-3	396	566	30.0		#3-2-2	47	68	30.9
	#1-3-1	139	183	24.0		#3-2-3	20	39	48.7
	#1-3-2	33	53	37.7		#3-3-2	30	112	73.2
	#1-3-3	60	101	40.6		成長知識領域	#2-2-3	14	35
	#2-1-1	56	90	37.8	#2-2-4		188	268	29.9
	#2-1-2	11	16	31.3	#2-3-3		37	72	48.6
	#2-1-3	158	286	44.8	#3-1-3		9	18	50.0
	#2-2-1	58	87	33.3	#3-3-1		19	76	75.0
	#2-2-2	53	93	43.0	#3-3-3		7	19	63.2

3.3.3.4. 知識領域間の関与性分析

2012年、2016年各時点での知識領域間のコサイン類似度を算出した(表 3.14)。コサイン類似度が高い知識領域間はそれらが何らかの関係を持つことを示している。例えば、高いコサイン類似度を示す#2-1-2PANi-Gと#2-2-3着用キャパシタは材料と用途という関係を持つ。PANi-Gは柔軟性と導電性を併せ持つため、着用キャパシタに用いられている。

成熟知識領域のコサイン類似度は2012~2016年で大差がない一方、一部の未成熟・成長知識領域・知識領域のコサイン類似度は大きな差が見られた。例えば、#2-3-3二硫化モリブデンのコサイン類似度の範囲は2012年では0.03~0.16であったが、2016年には0.21~0.43にまで大幅に増加した。したがって、知識領域が登場した直後に知識領域との関係は形成されることが読み取れた。そのため、EDLCの分野では未成熟・成長知識領域のみが新しく他の知識領域と複合していたことが読み取れた。

表 3.14 各知識領域間のコサイン類似度

発行年 (論文数)		~2012 (5446)																														
区分	知識領域 (赤字:成長知識領域)	複合材料知識領域					単体材料知識領域															用途知識領域			その他知識領域							
		#1-1-2	#1-1-3	#2-1-2	#2-1-3	#2-3-2	#1-1-1	#1-2-1	#1-2-2	#1-2-3	#2-1-1	#2-2-1	#2-3-1	#2-3-3	#3-1-1	#3-1-2	#3-1-3	#3-2-1	#3-2-2	#3-2-3	#3-3-1	#3-3-2	#3-3-3	#1-3-1	#2-2-1	#2-2-2	#2-2-3	#1-3-2	#1-3-3			
複合材料知識領域	#1-1-2MnO ₂ C	0.33	0.40	0.32	0.39	0.45	0.35	0.30	0.34	0.34	0.20	0.41	0.12	0.32	0.28	0.24	0.38	0.36	0.38	0.16	0.27	0.06	0.23	0.32	0.29	0.18	0.32	0.32				
	#1-1-3高分子電解質-活性炭炭素	0.33		0.32	0.30	0.35	0.37	0.32	0.29	0.30	0.31	0.18	0.38	0.12	0.25	0.23	0.18	0.28	0.27	0.28	0.17	0.21	0.05	0.24	0.34	0.29	0.19	0.33	0.37			
	#2-1-2PANi-G	0.40	0.32		0.39	0.42	0.37	0.35	0.30	0.34	0.42	0.23	0.41	0.16	0.34	0.30	0.23	0.37	0.37	0.36	0.18	0.29	0.05	0.20	0.37	0.31	0.22	0.29	0.29			
	#2-1-3GO-CNT	0.32	0.30	0.39		0.33	0.33	0.32	0.29	0.32	0.41	0.19	0.33	0.14	0.30	0.25	0.20	0.31	0.32	0.30	0.17	0.25	0.05	0.23	0.36	0.31	0.24	0.30	0.28			
	#2-3-2PANi-CNT	0.39	0.35	0.42	0.33		0.37	0.35	0.30	0.34	0.34	0.19	0.44	0.14	0.31	0.27	0.23	0.34	0.34	0.35	0.17	0.26	0.06	0.21	0.34	0.29	0.20	0.30	0.31			
単体材料知識領域	#1-1-1活性炭炭素	0.45	0.37	0.37	0.33	0.37					0.39	0.33	0.38	0.34	0.17	0.41	0.11	0.29	0.24	0.19	0.31	0.30	0.31	0.15	0.22	0.05	0.28	0.33	0.29	0.17	0.39	0.37
	#1-2-1窒素ドーブ多孔質炭素	0.35	0.32	0.35	0.32	0.35	0.39			0.40	0.44	0.37	0.19	0.34	0.12	0.29	0.25	0.20	0.32	0.30	0.32	0.17	0.25	0.05	0.21	0.30	0.27	0.19	0.35	0.32		
	#1-2-2バイオマス炭素材料	0.30	0.29	0.30	0.29	0.30	0.33	0.4			0.38	0.33	0.17	0.29	0.12	0.27	0.25	0.21	0.31	0.30	0.30	0.19	0.24	0.05	0.19	0.26	0.25	0.18	0.32	0.30		
	#1-2-3ECNF	0.34	0.30	0.34	0.32	0.34	0.38	0.44	0.38			0.36	0.17	0.32	0.12	0.30	0.26	0.20	0.32	0.32	0.31	0.19	0.25	0.05	0.21	0.29	0.27	0.20	0.34	0.29		
	#2-1-1窒素ドーブグラフェン	0.34	0.31	0.42	0.41	0.34	0.34	0.37	0.33	0.36			0.21	0.34	0.13	0.32	0.28	0.22	0.36	0.34	0.34	0.18	0.27	0.05	0.22	0.35	0.32	0.23	0.32	0.31		
	#2-2-4酸化鉄	0.20	0.18	0.23	0.19	0.19	0.17	0.19	0.17	0.21			0.20	0.10	0.20	0.22	0.14	0.22	0.24	0.20	0.17	0.16	0.04	0.12	0.23	0.21	0.16	0.15	0.17			
	#2-3-1ポリピロール	0.41	0.38	0.41	0.33	0.44	0.41	0.34	0.29	0.32	0.34	0.20			0.14	0.31	0.25	0.21	0.32	0.32	0.32	0.16	0.24	0.05	0.24	0.35	0.30	0.21	0.33	0.34		
	#3-3-2二硫化モリブデン	0.12	0.12	0.16	0.14	0.14	0.11	0.12	0.12	0.12	0.13	0.10	0.14			0.12	0.12	0.12	0.14	0.15	0.14	0.09	0.13	0.03	0.07	0.14	0.13	0.11	0.11	0.10		
	#3-1-1MnO ₂ ・TiO ₂ NT	0.32	0.25	0.34	0.30	0.31	0.29	0.29	0.27	0.30	0.32	0.20	0.31	0.12		0.29	0.23	0.35	0.33	0.33	0.20	0.27	0.07	0.18	0.30	0.28	0.21	0.25	0.24			
	#3-1-2酸化ニッケルコバルト	0.28	0.23	0.30	0.25	0.27	0.24	0.25	0.25	0.26	0.28	0.22	0.25	0.12	0.29		0.23	0.34	0.33	0.32	0.20	0.27	0.07	0.14	0.26	0.24	0.17	0.20	0.20			
	#3-1-3コバルト系複合酸化物	0.24	0.18	0.23	0.20	0.23	0.19	0.20	0.21	0.20	0.22	0.14	0.21	0.12	0.23	0.23		0.27	0.28	0.27	0.15	0.23	0.06	0.09	0.19	0.19	0.14	0.16	0.16			
	#3-2-1酸化ニッケル	0.38	0.28	0.37	0.31	0.34	0.31	0.32	0.31	0.32	0.36	0.22	0.32	0.14	0.35	0.34	0.27		0.39	0.41	0.21	0.32	0.07	0.18	0.30	0.29	0.19	0.26	0.27			
	#3-2-2酸化バナジウム	0.36	0.27	0.37	0.32	0.34	0.30	0.30	0.30	0.32	0.34	0.24	0.32	0.15	0.33	0.33	0.28	0.39		0.38	0.22	0.30	0.06	0.17	0.30	0.28	0.20	0.26	0.26			
	#3-2-3層状複合酸化物	0.38	0.28	0.36	0.30	0.35	0.31	0.32	0.30	0.31	0.34	0.20	0.32	0.14	0.33	0.32	0.27	0.41	0.38		0.20	0.31	0.07	0.17	0.29	0.27	0.20	0.26	0.25			
	#3-3-1MOF	0.16	0.17	0.18	0.17	0.17	0.15	0.17	0.19	0.19	0.18	0.17	0.16	0.09	0.20	0.20	0.15	0.21	0.22	0.20		0.19	0.05	0.12	0.19	0.19	0.14	0.15	0.16			
#3-3-2硫化金属	0.27	0.21	0.29	0.25	0.26	0.22	0.25	0.24	0.25	0.27	0.16	0.24	0.13	0.27	0.27	0.23	0.32	0.30	0.31	0.19		0.06	0.13	0.23	0.21	0.17	0.20	0.19				
#3-3-3ニッケルコバルト硫化物	0.06	0.05	0.05	0.05	0.06	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.04	0.05	0.03	0.07	0.07	0.06	0.07	0.06	0.07	0.05	0.06		0.04	0.04	0.06	0.02	0.05	0.05				
用途知識領域	#1-3-1用途開発	0.23	0.24	0.20	0.23	0.21	0.28	0.21	0.19	0.22	0.22	0.12	0.24	0.07	0.18	0.14	0.09	0.18	0.17	0.17	0.12	0.13	0.04		0.23	0.22	0.13	0.27	0.28			
	#2-2-1フレキシブルキャパシタ	0.32	0.34	0.37	0.36	0.34	0.33	0.30	0.26	0.29	0.35	0.23	0.35	0.14	0.30	0.26	0.19	0.30	0.30	0.29	0.19	0.23	0.04	0.23		0.35	0.26	0.29	0.29			
	#2-2-2マイクロキャパシタ	0.29	0.29	0.31	0.31	0.29	0.29	0.27	0.25	0.27	0.32	0.21	0.30	0.13	0.28	0.24	0.19	0.29	0.28	0.27	0.19	0.21	0.06	0.22	0.35		0.22	0.28	0.27			
その他知識領域	#2-2-3着目キャパシタ	0.18	0.19	0.22	0.24	0.20	0.17	0.19	0.18	0.20	0.23	0.16	0.21	0.11	0.21	0.17	0.14	0.19	0.20	0.20	0.14	0.17	0.02	0.13	0.26	0.22		0.17	0.17			
	#1-3-2細孔	0.32	0.33	0.29	0.30	0.30	0.39	0.35	0.32	0.34	0.32	0.15	0.33	0.11	0.25	0.20	0.16	0.26	0.26	0.26	0.15	0.20	0.05	0.27	0.29	0.28	0.17	0.40				
	#1-3-3電解質	0.32	0.37	0.29	0.28	0.31	0.37	0.32	0.30	0.29	0.31	0.17	0.34	0.10	0.24	0.20	0.16	0.27	0.26	0.25	0.16	0.19	0.05	0.28	0.29	0.27	0.17	0.40				

3.3.3.5. 各国の研究活動方針比較

アメリカ・中国・韓国・日本の出版論文のうち、未成熟・成長知識領域に属する論文数とその比率を算出した(表 3.15)。その結果、中国が群を抜いて高い値(18.3%)、日本は低い値(4.5%)を示した。この値は未成熟・成長知識領域の研究

活動の集中度合いと比例するため、各国の研究活動方針は大きく異なっていることが示唆できる。ここでは各国の研究活動方針が大きく異なる背景の 1 つに各国の政策活動があると考え、各国の EDLC に関する科学政策活動を比較した。以下に中国・日本の政策活動を例示する(JST, 2019)。

中国は重点的に革新的な蓄電池の開発に取り組んでいる。例えば、「中国国家重点基礎研究発展計画(973 計画)」では 300 Wh/kg 以上のエネルギー密度を目標とした革新型蓄電池の基礎研究が行われている。また、中国では着用キャパシタの人気の非常に高く、EDLC がすでに社会に広く浸透しているという社会背景がある。中国都市部人口の半分以上がスマートリストバンドを所有しており(Xu, 2018)、着用デバイスの市場規模は急激に拡大している(Lin, 2019)。

一方、日本は EDLC だけではなく固体電池などの分野にも力を入れている。日本の蓄電池は主に自動車向けであるため、リチウムイオン電池や全固体電池の研究が盛んである。実際に、ALCA-SPRING、Rising II、など全固体電池に主軸をおいた研究プロジェクトが多く打ち出されている。

以上より、未成熟・成長知識領域に属する論文数の割合が高い中国は革新的な蓄電池の開発に重点を置いている。中国や欧米では大型定置用蓄電池の研究が主流であり、リチウムイオン電池に関する研究には比較的消極的である。これに対して、日本は EDLC だけではなくリチウムイオン電池や全固体電池などにも注力している。したがって、未成熟・成長知識領域に属する論文の比率(表 3.15)に反各国の研究活動方針を映させることができた。

表 3.15 各国の出版論文のうち未成熟・成長知識領域に属する数とその比率

国	論文出版数		未成熟・成長知識領域 に属する論文の割合
	全て	未成熟・成長知識領域	
全体	66153	8423	12.7%
中国	28232	5166	18.3%
アメリカ	6444	620	9.6%
韓国	5329	669	12.6%
日本	2158	97	4.5%

次に、各国の研究力の分配方針を比較した。その際に各未成熟・成長知識領域の被引用数上位 100 論文合計 600 本(以下、“High Impact Paper(HIP)”と称する)と 4 カ国(アメリカ・中国・韓国・日本)を分析対象とし、以下 2 つの指標を用いて HIP 出版数の分散を算出した。

1 つ目の指標は研究機関間の分散である。各国の HIP 出版数を研究機関ごとに数え、研究機関間の変動係数を算出した(表 3.16)。表 3.17 には各国の HIP 出版数上位 5 研究機関を記載した(なお、付録の表 A.6 に HIP を出版した全ての研究機関を記載した)。この結果から各国の HIP 出版数が一部の研究機関に一極集中している、あるいは、多くの研究機関に分散しているかを調査した。アメリカ・中国・韓国・日本の研究機関間の変動係数はそれぞれ 1.281、1.763、0.673、0.929 であり、中国が高い値、アメリカと日本は中間、韓国は低い値を示した。したがって、中国は一部の研究機関に HIP 出版数が偏っており、一方韓国では幅広い研究機関に HIP 出版数が分散していると判断した。

また、THE の 2018 年度の大学ランキングと HIP 出版数の相関性を調査したところ、FET の場合と同様に、中国以外では大学ランキングと HIP 出版数の相関性が見られた(THE, 2018)。中国では HIP 出版数 1 位、2 位の研究機関はそれぞれ MOE、CAS であり、FET 分野の場合も同様の結果であった点から、複数の分野で中国の HIP 出版数が MOE と CAS に集中していることが推測できた。

2 つ目の指標は知識領域間の分散である。各国の HIP 出版数を知識領域ごとに数え(表 3.18)、知識領域間の変動係数を算出した(表 3.16)。この結果から各国の HIP 出版数が一部の知識領域に集中している、あるいは、幅広い知識領域に分散しているかを調査した。アメリカ・中国・韓国・日本の各国の知識領域間の変動係数はそれぞれ 0.334、0.151、0.414、0.894 であり、中国が低い値、アメ

リカと韓国が中間、日本が高い値を示した。したがって、中国は幅広い知識領域に HIP 出版数が分散しており、一方で日本は一部の知識領域に HIP 出版数が集中していることが推測できた。実際に、中国の研究機関である MOE と CAS が最多 HIP を出版した知識領域はそれぞれ#2-2-3 着用キャパシタ、#3-3-3 ニッケルコバルト硫化物であり、研究機関によって強みとする知識領域が異なっていた。

表 3.16 各国の知識領域・研究機関における HIP 出版数の変動係数

国	変動係数	
	研究機関	知識領域
アメリカ	1.281	0.334
中国	1.763	0.151
韓国	0.673	0.414
日本	0.929	0.894

表 3.17 各国の HIP 出版数上位 5 研究機関

国	出版数	機関 (大学ランキング順位) 赤文字: 上位 100 研究機関
アメリカ	18	Georgia Institute of Technology (33)
	6	University of California, Los Angeles (15), University of Central Florida
	5	Rice University (86), University of California, Santa Cruz (162)
中国	68	Ministry of Education
	54	Chinese Academy of Sciences
	36	Huazhong University of Science and Technology (401-500)
	35	Zhejiang University (177)
	30	Fudan University (116)
韓国	9	Hanyang University (351-400)
	6	Jeju National University, Seoul National University (74)
	5	Pusan National University (601-800)
	4	Korea Institute of Science and Technology
日本	6	National Institute for Materials Science
	2	Tohoku University (201-250)
	1	Kyushu Institute of Technology (801-1000), Shizuoka University (801-1000), Tokai University (801-1000), University of Tsukuba (401-500), Waseda University (601-800)

表 3.18 各国の知識領域別 HIP 出版数

国	知識領域					
	#2-2-3	#2-2-4	#2-3-3	#3-1-3	#3-3-1	#3-3-3
アメリカ	27	21	15	14	16	9
中国	82	80	54	65	67	84
韓国	9	4	15	10	9	5
日本	0	1	4	0	3	2

3.3.4. 光触媒

本節では、3.2 で説明した手法で光触媒分野を分析した結果を述べる。

3.3.4.1. 分析対象分野の概要

光触媒とは、紫外光線や太陽光などの光を当てるとその表面で強い酸化が起こる物質を指す。光触媒の表面に付着している有機物や細菌は光が当たると酸化作用によって二酸化炭素や水に分解され、表面の汚れは除去される。この性質を活かして光触媒は浄水、大気清浄、抗菌、などに応用されている。

光触媒の起源は 1911 年に発見された酸化亜鉛の照光による濃青色の色素プロイセン・ブルーの漂白現象と言われている(Eibner, 1911; Coronado, 2013)。以後、光触媒を用いたホルムアルデヒドの生成や(Baly, 1921)、光増感材が開発されたが(Goodeve, 1938)、以後しばらく光触媒は実用的な用途が発見されず研究の関心が薄れていた。しかし、1972 年に光触媒を用いた水素の効率的な生成方法が開発され、後にノーベル賞を受賞したこの大発見は光触媒が再び注目を集めるきっかけとなった(Fujishima, 1972)。その後、チタン酸ストロンチウムによる水素生成や TiO_2 と PtO_2 を用いた水素とメタンの生成など(Wanger, 1980)、光触媒を用いた水素生成技術に関する研究が再び盛んに行われるようになった(Sakata, 1981)。それゆえ、今後も新しい半導体材料を用いた高性能な光触媒が開発されることが予測される。

近年、水素はそのクリーンさなどから化石燃料に代わるエネルギーとして注目されている。しかし、水素がクリーンであるためには水素を人工的に作り出す製造法自体もクリーンである(排気ガスを輩出しない)ことが不可欠である。このような背景のもと、水素生成において水と酸素のみを排出する光触媒は、クリーンな水素製造法を実現する技術として期待されている(Sun, 2011)。

3.3.4.2. 知識領域の抽出とラベリング

検索語を”photocatal*” (*はワイルドカード)に設定し、タイトル、アブストラクト、キーワードのいずれかに設定した検索語が含まれる論文を抽出した。抽出した論文の引用ネットワークを作成し、クラスタリングを行った。十分に細かい知識領域を得るために 3 回のクラスタリングを行った。

① クラスタリング 1 回目

抽出した論文のうち最大連結部に含まれる割合は約 97%(100701 本中 98238 本)であった。この最大連結部のクラスタリングの結果 178 個のクラスタが得られ、それぞれに含まれる論文数は降順に 145407、34901、16204、380...2 であった。以下、論文数が a 番目に大きいクラスタを“#a”と称する。これらのクラスタのうち提案手法では論文数が多い#1, #2, #3 を分析対象とした。

② クラスタリング 2 回目

#1~3 を再度クラスタリングし、より細かいクラスタ(サブクラスタ)を得た。以下、クラスタ#a から派生したサブクラスタのうち b 番目に論文数が多いものを“#a-b”と称する。提案手法では論文数が多い#1-1~3, #2-1~3, #3-1~3 を分析対象とした。

③ クラスタリング 3 回目

#1-1~3, #2-1~3, #3-1~3 を再度クラスタリングし、より細かいクラスタ(サブサブクラスタ)を得た。以下、サブクラスタ#a-b から派生したサブサブクラスタのうち c 番目に論文数が多いものを“#a-b-c”、サブサブクラスタを「知識領域」と称する。提案手法では、得られたサブサブクラスタのうち論文数が多い#1-1-1~3, #1-2-1~3, #1-3-1~3, #2-1-1~3, #2-2-1~3, #2-3-1~3, #3-1-1~3, #3-2-1~3, #3-3-1~3 を分析対象とした。

表 3.19 に示す各知識領域の特徴語をもとにそれぞれ#1-1-1 色素分解、#1-1-2 物質変換素子、#1-1-3 消毒、#1-2-1TiO₂ ナノチューブ(TiO₂NT)、#1-2-2 可視光応答型光触媒、#1-2-3 金属ドーブ TiO₂、#1-3-1 酸化チタン-二酸化ケイ素(TiO₂-SiO₂)、#1-3-2 空気清浄、#1-3-3 ガラス表面コーティング、#2-1-1 プラズモン、#2-1-2 酸化金属ビスマス、#2-1-3 ハロゲン化酸化ビスマス、#2-2-1 金属複合材、#2-2-2 グラフェン複合材、#2-2-3 複合体、#2-3-1 窒化炭素、#2-3-2 二硫化モリブデン、#2-3-3CO₂削減、#3-1-1 酸化亜鉛ナノ構造、#3-1-2 銀-酸化亜鉛(Ag-ZnO)、#3-1-3 酸化スズ(SnO₂)複合材、#3-2-1 酸化鉄、#3-2-2TiO₂の相、#3-2-3 酸化銅、#3-3-1 クロスカップリング反応、#3-3-2 ゼオライト、#3-3-3 トリフルオロメチル化、と名付けた。なお、各知識領域の上位 10 TF-IDF の単語は付録の表 A.7 に記載した。

表 3.19 各知識領域の特徴語

知識領域	単語	TF-IDF	知識領域	単語	TF-IDF	知識領域	単語	TF-IDF
#1-1-1	dye	0.00471	#2-1-1	plasmonic	0.00269	#3-1-1	nanostructures	0.00171
	decolorization	0.00217		#2-1-2	bivo4	0.00667	#3-1-2	ag-zno
#1-1-2	reactor	0.00253	#2-1-3		bi2wo6	0.00471	#3-1-3	sno2
#1-1-3	disinfection	0.00314		#2-2-1	single crystal	0.0028	#3-2-1	fe2o3
#1-2-1	tio2 nanotube	0.00187	#2-2-2		conjugated	0.0063	#3-2-2	tio2
#1-2-2	visible light	0.00279		#2-2-3	srtio3	0.00332		#3-2-3
#1-2-3	doped tio2	0.00176	#2-3-1		graphene	0.00620	#3-3-1	
	rutile	0.00154		#2-3-2	composite	0.00322		#3-3-2
#1-3-1	sio2	0.00304	#2-3-3		complex	0.00430	#3-3-3	
	composite	0.00290		#2-3-3	c3n4	0.00812		#3-3-3
	titania	0.00196	#2-3-3		mos2	0.00444	#3-3-3	
#1-3-2	air	0.00325		#2-3-3	co2	0.00661		#3-3-3
	oxidation	0.00311	#2-3-3		reduction	0.00366	#3-3-3	
#1-3-3	coating	0.00320						

特徴語をもとに各知識領域を「複合材料知識領域」、「単体材料知識領域」、「用途知識領域」の3つの区分に分類した(表 3.20)。複合材料知識領域、単体材料知識領域、用途知識領域にはそれぞれ7個、12個、9個の知識領域が分類された。複合材料知識領域には、#1-3-1TiO₂-SiO₂、#2-1-2酸化金属ビスマス、#2-2-1金属複合材、#2-2-2グラフェン複合材、#2-3-3CO₂削減、#3-1-2Ag-ZnO、#3-1-3ヒ化インジウムが分類された。単体材料知識領域には、#1-2-1TiO₂NT、#1-2-3金属ドーピングTiO₂、#2-1-1プラズモン、#2-1-3ハロゲン化酸化ビスマス、#2-2-3複合体、#2-3-1窒化炭素、#2-3-2二硫化モリブデン、#3-1-1酸化亜鉛ナノ構造、#3-2-1酸化鉄、#3-2-2TiO₂の相、#3-2-3酸化銅、#3-3-2ゼオライトが分類された。用途知識領域には、#1-1-1色素分解、#1-1-2物質変換素子、#1-1-3消毒、#1-2-2可視光応答型光触媒、#1-3-2空気清浄、#1-3-3ガラス表面コーテ

ィング、#3-3-1 クロスカップリング反応、#3-3-3 トリフルオロメチル化が分類された。

複合材料知識領域に着目すると、金属材料を含む複合材料に関する知識領域が多く見られた。単体材料知識領域では、TiO₂ など金属材料に関する知識領域が多く存在し、また窒化炭素などカーボン材料に関する知識領域も見られた。用途知識領域では、消毒やガラス表面コーティングなどエンドユーザー向け用途に関する知識領域や、ラジカルカップリングの促進を目的とした産業向け用途に関する知識領域も存在した。

表 3.20 各知識領域の区分

区分	知識領域
複合材料知識領域	#1-3-1TiO ₂ -SiO ₂ 、#2-1-2 酸化金属ビスマス、#2-2-1 金属複合材、#2-2-2 グラフェン複合材、#2-3-3CO ₂ 削減、#3-1-2Ag-ZnO、#3-1-3 SnO ₂ 複合材
単体材料知識領域	#1-2-1TiO ₂ NT、#1-2-3 金属ドーピング TiO ₂ 、#2-1-1 プラズモン、#2-1-3 ハロゲン化酸化ビスマス、#2-2-3 複合体、#2-3-1 窒化炭素、#2-3-2 二硫化モリブデン、#3-1-1 酸化亜鉛ナノ構造、#3-2-1 酸化鉄、#3-2-2TiO ₂ の相、#3-2-3 酸化銅、#3-3-2 ゼオライト
用途知識領域	#1-1-1 色素分解、#1-1-2 物質変換素子、#1-1-3 消毒、#1-2-2 可視光応答型光触媒、#1-3-2 空気清浄、#1-3-3 ガラス表面コーティング、#3-3-1 クロスカップリング反応、#3-3-3 トリフルオロメチル化

3.3.4.3. 知識領域の成熟度算出

各知識領域に含まれる論文数とその平均出版年を算出した。図 3.5 に各知識領域に含まれる論文数とその平均出版年を図示した。縦軸は各知識領域に含まれる論文の平均出版年、円の大きさは知識領域に含まれる論文数を表す。垂直線上に並ぶ円は同じサブクラスタから派生した知識領域を意味する。この結果から以下 2 つの傾向が見られた。

まず、同じサブクラスタから派生した知識領域の平均出版年は近くなる傾向がある。例えば、#1-2TiO₂ から派生した知識領域の平均出版年の範囲は 2012.2~2012.3 年であった。しかし、#3-3 可視光応答型光触媒から派生した知識領域の平均出版年の範囲は 2007.7~2016.0 年であり、派生した知識領域の平均出版年の範囲が広いサブクラスタも一部存在した。

次に、論文数が多い知識領域は平均出版年が古い傾向がある。例えば、#1-1 浄水、#3-1 酸化亜鉛からそれぞれ派生する知識領域は論文数が多いものほど平均出版年が古い。論文数が多く平均出版年が古い知識領域は、他の知識領域よりも知識の蓄積が多く成長率が低いことを表している。したがって、それらの知識領域は成熟しており、今後大きく成長する可能性が低いことが推測できる。

論文数と平均出版年から各知識領域の成熟度を以下のように評価した。#3-3-1 クロスカップリング反応は他の知識領域よりも平均出版年が新しく論文数が少ないため、未成熟であると判断した。一方、#1-1-2 物質変換素子や#1-3-2 空気清浄は平均出版年が古く論文数が多いため、成熟しているとみなした。しかし、#2-3-1 窒化炭素や#1-3-1TiO₂-SiO₂のように論文数と平均出版年が比例していない(平均出版年が新しいが論文数が多い、あるいは、平均出版年は古いが論文数が少ない)ため成熟度の判断が難しい知識領域も一部存在していた。

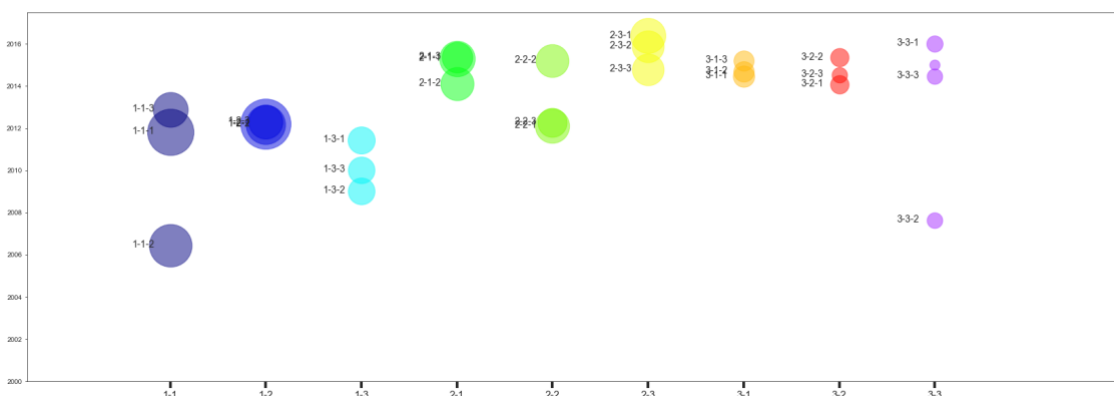


図 3.5 各知識領域の論文数と平均出版年の関係

知識領域の論文数と平均出版年には大まかな相関関係があるため、大半の知識領域は論文数と平均出版年からその成熟度を推測することができた。しかし、上記で述べたように論文数と平均出版年が比例しない知識領域も一部存在していた。それゆえ、正確に知識領域の成熟度を見積もるためには論文数と平均出版年を独立させて考慮する必要がある。

提案手法では、3.2.6 で述べた論文数と平均出版年の 2 軸から成るマトリクスを用いて知識領域の成熟度を「未成熟・成長」と「成熟」の 2 区分に分類した(表 3.21)。以下、各区分に分類された知識領域をそれぞれ「未成熟・成長知識領域」、「成熟知識領域」と称する。マトリクスの分類の結果、未成熟・成長知識領域には#2-1-3 ハロゲン化酸化ビスマス、#3-1-3SnO₂ 複合材、#3-2-3 酸化銅、#3-3-1

クロスカップリング反応の4つが分類された。

材料知識領域に着目すると、#1-2-1TiO₂NT など TiO₂に関する知識領域が成熟しているが、#2-1-3 ハロゲン化酸化ビスマスなど二次元半導体、#3-1-3SnO₂ 複合材など複合材料知識領域は成熟度が低い傾向が見られた。従来の光触媒材料である TiO₂はコスト面や安全面などにおいては優れているが、太陽光による光触媒活性が不可能である点が課題であった。その課題の解決に向けて新しい光触媒材料の開発が行われており、本結果はそのような背景を反映していると考えられる。

用途知識領域に着目すると、浄水や空気清浄など光触媒の物質分解を活かした技術に関する知識領域の多くが成熟していた。一方で、アリル化など光触媒の酸化還元反応を活かした化学反応促進に関する知識領域の成熟度が低く、光触媒の用途開発の変移が読み取れた。

表 3.21 各知識領域の成熟度

区分	エリア	知識領域
成熟知識領域	Aa	#1-1-1 色素分解、#1-1-2 物質変換素子、#1-2-3 金属ドーピング TiO ₂
	Ab	#1-3-1 TiO ₂ -SiO ₂ 、#1-3-2 空気清浄、#1-3-3 ガラス表面コーティング、#3-3-2 ゼオライト
	Ba	#1-1-3 消毒、#1-2-1TiO ₂ NT、#1-2-2 可視光応答型光触媒、#2-1-2 酸化金属ビスマス、#2-2-1 金属複合材、#2-2-2 グラフェン複合材 #2-3-3CO ₂ 削減
	Bb	#2-2-3 複合体、#3-1-1 酸化亜鉛ナノ構造、#3-1-2 Ag-ZnO、#3-1-3 SnO ₂ 複合材、#3-2-1 酸化鉄、#3-2-2TiO ₂ の相、#3-3-3 トリフルオロメチル化
	Ca	#2-1-1 プラズモン、#2-3-1 窒化炭素、#2-3-2 二硫化モリブデン
未成熟・成長知識領域	Cb	#2-1-3 ハロゲン化酸化ビスマス、#3-2-3 酸化銅、#3-3-1 クロスカップリング反応

各知識領域の商業化のスピードを分析するために、各知識領域の論文抽出時から2年間(2018/11/28~2020/11/27)の特許の増加率を算出した。論文抽出時と2年後の特許数(以下それぞれを“A”、“B”と称する)を数え、 $\frac{B-A}{A}$ を特許の増加率

とした(表 3.22)。特許の検索には WIPO が運営する国内・国際特許データベースを用いた(WIPO)。なお、その際に設定した各知識領域の検索語は付録の表 A.8 に記載した。

未成熟・成長知識領域である#2-1-3 ハロゲン化酸化ビスマスと#2-3-1 窒化炭素が最も高い特許の増加率(それぞれ 54.5, 55.5%)を示した。3.3.2.3 で説明したように、これは知識領域の商業化が急速に進んでいることを表している。以上より、提案手法で定義したマトリクスで未成熟・成長知識領域を定義することで急速な商業化が進んでいる知識領域を抽出することに成功した。

表 3.22 各知識領域の特許数とその増加率

区分	知識領域	A	B	$\frac{B-A}{B}$ [%]	区分	知識領域	A	B	$\frac{B-A}{B}$ [%]
成熟知識領域	#1-1-1	21	39	46.2	成熟知識領域	#2-3-1	191	429	55.5
	#1-1-2	1602	2233	28.3		#2-3-2	105	205	48.8
	#1-1-3	606	997	39.2		#2-3-3	850	1306	34.9
	#1-2-1	26	38	31.6		#3-1-1	68	105	35.2
	#1-2-2	87	126	31.0		#3-1-2	44	72	38.9
	#1-2-3	563	664	15.2		#3-2-1	184	270	31.9
	#1-3-1	443	523	15.3		#3-2-2	268	353	24.1
	#1-3-2	47	61	23.0		#3-2-2	1729	1892	8.6
	#1-3-3	2050	2251	8.9		未成熟・成長知識領域	#3-3-2	351	411
	#2-1-1	61	100	39.0	#3-3-3		3	5	40.0
	#2-1-2	241	387	37.7	#2-1-3		96	170	43.5
	#2-2-1	99	126	21.4	#3-1-3		50	59	15.3
	#2-2-2	441	715	38.3	#3-2-3		267	374	28.6
	#2-2-3	53	69	23.2	#3-3-1	5	11	54.5	

3.3.4.4. 知識領域間の関与性分析

2012年、2018年各時点での知識領域間のコサイン類似度を算出した(表 3.23)。コサイン類似度が高い知識領域間はそれらが何らかの関係を持つことを示している。例えば、高いコサイン類似度を示す#1-2-1TiO₂NT と#1-2-2 可視光応答型光触媒は材料と用途という関係を持つ。

成熟知識領域間のコサイン類似度は 2012~2018 年で大差がない一方、一部の未成熟・成長知識領域-知識領域間のコサイン類似度は急増していた。例えば、#3-3-1 クロスカップリング反応と他の知識領域のコサイン類似度の範囲は 2012 年では 0.16~0.25 であったが、2018 年には 0.24~0.49 にまで大幅に増加した。一方、成熟知識領域同士間のコサイン類似度は大きく変化しなかった。したがって、知識領域が登場した直後に知識領域との関係は形成されていた。そのため、光触媒の分野では未成熟・成長知識領域のみが新しく他の知識領域と複合することが読み取れた。

表 3.23 各知識領域間のコサイン類似度

発行年 (論文数)		~2012 (28834)																									
区分	知識領域 (赤文字:成長知識領域)	複合材料知識領域						単体材料知識領域						用途知識領域													
		#1-1-1	#1-1-2	#2-1-1	#2-1-2	#2-1-3	#2-1-4	#1-2-1	#1-2-2	#2-1-1	#2-1-2	#2-1-3	#2-1-4	#1-1-1	#1-1-2	#1-1-3	#1-1-4	#1-1-5	#1-1-6	#1-1-7	#1-1-8	#1-1-9	#1-1-10				
複合材料知識領域	#1-1-3TiO ₂ /SiO ₂	0.39	0.38	0.40	0.39	0.38	0.36	0.46	0.46	0.38	0.37	0.38	0.32	0.36	0.38	0.37	0.33	0.35	0.39	0.42	0.39	0.38	0.46	0.43	0.47	0.17	0.19
	#2-1-2酸化金属ビスマス	0.39	0.45	0.43	0.37	0.43	0.40	0.41	0.42	0.45	0.48	0.36	0.36	0.39	0.42	0.41	0.36	0.39	0.34	0.37	0.33	0.32	0.44	0.34	0.37	0.17	0.20
	#2-2-1金属複合材	0.38	0.45	0.39	0.40	0.38	0.35	0.41	0.43	0.40	0.39	0.38	0.34	0.39	0.36	0.35	0.33	0.33	0.36	0.35	0.33	0.30	0.45	0.34	0.37	0.17	0.20
	#2-2-2グラフェン複合材	0.40	0.43	0.39	0.38	0.44	0.43	0.40	0.40	0.44	0.43	0.38	0.39	0.45	0.43	0.42	0.39	0.41	0.35	0.35	0.31	0.32	0.42	0.34	0.37	0.18	0.22
	#2-3-3CO ₂ 削減	0.39	0.37	0.40	0.38	0.35	0.33	0.36	0.40	0.39	0.35	0.43	0.34	0.40	0.35	0.34	0.33	0.32	0.42	0.34	0.34	0.32	0.39	0.37	0.35	0.22	0.26
	#3-1-2Ag-ZnO	0.38	0.43	0.38	0.44	0.35	0.46	0.38	0.40	0.43	0.44	0.34	0.37	0.40	0.48	0.41	0.37	0.42	0.35	0.34	0.29	0.30	0.40	0.33	0.37	0.18	0.20
単体材料知識領域	#3-1-3SnO ₂ 複合材	0.36	0.40	0.35	0.43	0.33	0.46	0.35	0.36	0.40	0.42	0.32	0.36	0.39	0.45	0.43	0.37	0.42	0.32	0.31	0.27	0.28	0.36	0.30	0.34	0.17	0.19
	#1-2-1TiO ₂ NT	0.46	0.41	0.41	0.40	0.36	0.38	0.35	0.48	0.39	0.38	0.36	0.29	0.35	0.38	0.37	0.33	0.34	0.34	0.42	0.39	0.35	0.50	0.39	0.46	0.14	0.17
	#1-2-3金属ドープTiO ₂	0.46	0.42	0.43	0.40	0.40	0.40	0.36	0.48	0.41	0.39	0.38	0.32	0.36	0.37	0.36	0.34	0.34	0.38	0.42	0.39	0.36	0.52	0.42	0.45	0.17	0.19
	#2-1-1プラズモン	0.38	0.45	0.40	0.44	0.39	0.43	0.40	0.39	0.41	0.44	0.38	0.38	0.41	0.39	0.39	0.38	0.39	0.37	0.35	0.32	0.33	0.42	0.35	0.37	0.19	0.22
	#2-1-3ハロゲン化酸化ビスマス	0.37	0.48	0.39	0.43	0.35	0.44	0.42	0.38	0.39	0.44	0.35	0.38	0.40	0.43	0.43	0.38	0.41	0.33	0.34	0.29	0.30	0.41	0.32	0.35	0.18	0.20
	#2-2-3複合体	0.38	0.36	0.38	0.38	0.43	0.34	0.32	0.36	0.38	0.38	0.35	0.33	0.39	0.33	0.33	0.31	0.31	0.41	0.37	0.37	0.33	0.38	0.36	0.34	0.25	0.27
	#2-3-1窒化炭素	0.32	0.36	0.34	0.39	0.34	0.37	0.36	0.29	0.32	0.38	0.38	0.33	0.39	0.34	0.35	0.34	0.34	0.32	0.26	0.24	0.25	0.34	0.28	0.28	0.20	0.23
	#2-3-2二硫化モリブデン	0.36	0.39	0.39	0.45	0.40	0.40	0.39	0.35	0.36	0.41	0.40	0.39	0.39	0.39	0.38	0.36	0.37	0.37	0.31	0.29	0.28	0.37	0.31	0.33	0.20	0.24
	#3-1-1酸化亜鉛ナノ構造	0.38	0.42	0.36	0.43	0.35	0.48	0.45	0.38	0.37	0.39	0.43	0.33	0.34	0.39	0.44	0.38	0.43	0.34	0.33	0.29	0.30	0.38	0.32	0.36	0.17	0.20
	#3-2-1酸化鉄	0.37	0.41	0.35	0.42	0.34	0.41	0.43	0.37	0.36	0.39	0.43	0.33	0.35	0.38	0.44	0.38	0.42	0.33	0.31	0.27	0.28	0.36	0.31	0.34	0.17	0.20
	#3-2-2酸化チタンの相	0.33	0.36	0.33	0.39	0.33	0.37	0.37	0.33	0.34	0.38	0.38	0.31	0.34	0.36	0.38	0.38	0.37	0.31	0.27	0.24	0.25	0.35	0.28	0.31	0.16	0.19
	#3-2-3酸化銅	0.35	0.39	0.33	0.41	0.32	0.42	0.42	0.34	0.34	0.39	0.41	0.31	0.34	0.37	0.43	0.42	0.37	0.32	0.30	0.26	0.28	0.34	0.29	0.33	0.17	0.20
#3-3-2ゼオライト	0.39	0.34	0.36	0.35	0.42	0.35	0.32	0.34	0.38	0.37	0.33	0.41	0.32	0.37	0.34	0.33	0.31	0.32	0.33	0.33	0.30	0.37	0.35	0.33	0.24	0.26	
用途知識領域	#1-1-1色素分解	0.42	0.37	0.35	0.35	0.34	0.34	0.31	0.42	0.42	0.35	0.34	0.37	0.26	0.31	0.33	0.31	0.27	0.30	0.33	0.50	0.45	0.42	0.42	0.39	0.16	0.18
	#1-1-2物質変換素子	0.39	0.33	0.33	0.31	0.34	0.29	0.27	0.39	0.39	0.32	0.29	0.37	0.24	0.29	0.29	0.27	0.24	0.26	0.33	0.50	0.46	0.39	0.44	0.37	0.17	0.18
	#1-1-3消毒	0.38	0.32	0.30	0.32	0.32	0.30	0.28	0.35	0.36	0.33	0.30	0.33	0.25	0.28	0.30	0.28	0.25	0.28	0.30	0.45	0.46	0.36	0.41	0.38	0.16	0.18
	#1-2-2可視光応答型光触媒	0.46	0.44	0.45	0.42	0.39	0.40	0.36	0.50	0.52	0.42	0.41	0.38	0.34	0.37	0.38	0.36	0.35	0.34	0.37	0.42	0.39	0.36	0.40	0.45	0.16	0.19
	#1-3-2空気清浄	0.43	0.34	0.34	0.37	0.33	0.30	0.39	0.42	0.35	0.32	0.36	0.28	0.31	0.32	0.31	0.28	0.29	0.35	0.42	0.44	0.41	0.40	0.40	0.48	0.18	0.19
	#1-3-3ガラス表面コーティング	0.47	0.37	0.37	0.37	0.35	0.37	0.34	0.46	0.45	0.37	0.35	0.34	0.28	0.33	0.36	0.34	0.31	0.33	0.33	0.39	0.37	0.38	0.45	0.40	0.16	0.18
#3-3-1クロスカップリング反応	0.17	0.17	0.18	0.22	0.18	0.17	0.14	0.17	0.19	0.18	0.25	0.20	0.20	0.17	0.17	0.16	0.17	0.24	0.16	0.17	0.16	0.16	0.18	0.16	0.24	0.24	
#3-3-3トリフルオロメチル化	0.19	0.20	0.20	0.22	0.26	0.20	0.19	0.17	0.19	0.22	0.20	0.27	0.23	0.24	0.20	0.20	0.19	0.20	0.26	0.18	0.18	0.18	0.19	0.19	0.18	0.24	

3.3.4.5. 各国の研究活動方針比較

中国・アメリカ・韓国・日本国の出版論文のうち、未成熟・成長知識領域に属する論文数とその比率を算出した(表 3.24)。中国が高い値(8.6%)を示した一方、日本は低い値(2.2%)を示し、大きな差が見られた。この値は未成熟・成長知識領域の研究活動の集中度合いと比例するため、各国の研究活動方針が大きく異なることが示唆された。ここでは各国の研究活動方針が大きく異なる背景の 1 つに

各国の政策活動があると考え、各国の光触媒に関する政策活動を比較した。以下に中国・日本の政策活動を例示する(JST, 2019)。

中国は光触媒による合成化学技術に重点を置いている。例えば、浙江石油化工は光触媒技術を活用した原油化学品の製造プラントを建設した。

一方、日本では人工光合成の開発に力を入れている。人工光合成とは、人工的に二酸化炭素を酸素と水に転換させる技術である。実際に、日本では人工光合成に関するプロジェクトが多数打ち出されており、例えば二酸化炭素原料化基幹化学 品製造プロセス技術開発 (2014~2021 年)などがある。

このように、未成熟・成長知識領域に属する論文数の割合が高い中国では化学反応促進など未成熟・成長知識領域に関与する技術の強化に取り組んでいる。一方、日本は人工光合成に注力しており、各国で焦点を置く知識領域に違いが見られた。以上より、未成熟・成長知識領域に属する論文数の比率(表 3.24)を算出することで、各国の研究活動方針を分析することに成功した。

表 3.24 各国の出版論文のうち未成熟・成長知識領域に属する数とその比率

国	論文出版数		未成熟・成長知識領域 に属する論文の割合
	全て	未成熟・成長知識領域	
全体	120557	7260	6.0%
中国	42565	3680	8.6%
アメリカ	8892	471	5.3%
日本	8110	178	2.2%
韓国	5167	260	5.0%

次に、各国の研究力の分配方針を比較した。その際に各未成熟・成長知識領域の被引用数上位 100 論文合計 500 本(以下、“High Impact Paper(HIP)”と称する)と論文出版数上位 4 カ国(アメリカ・中国・韓国・日本)を分析対象とし、以下 2 つの指標を用いて HIP 出版数の分散を算出した。

1 つ目の指標は研究機関間の分散である。各国の HIP 出版数を研究機関ごとに数え、研究機関間の変動係数を算出した(表 3.25)。表 3.26 には各国の HIP 出版数上位 5 研究機関を記載した(なお、付録の表 A.9 に HIP を出版した全ての研究機関を記載した)。この結果から各国の HIP 出版数が一部の研究機関に一極集中している、あるいは、多くの研究機関に分散しているかを調査した。アメリ

カ・中国・韓国・日本の研究機関間の変動係数はそれぞれ 1.085、1.681、0.907、1.411 であり、中国と日本が高い値、アメリカと韓国は低い値を示した。したがって、中国と日本は一部の研究機関に HIP 出版数が偏っており、一方、アメリカと韓国では幅広い研究機関に分散していると判断した。

また、THE の 2018 年度の大学ランキングと HIP 出版数の相関性を調査した結果、中国以外では大学ランキングと HIP 出版数の相関性が見られ、FET と EDLC の場合と同様の結果が得られた (THE, 2018)。中国の HIP 出版数 1 位、2 位の研究機関はそれぞれ MOE、CAS であり、中国の HIP 出版数上位の研究機関は他国とは異なる特徴が見られた。さらに、FET・EDLC 分野の場合も同様の結果であったため、分野に関わらず MOE、CAS に中国の HIP 出版数が集中していることが分かる。

2 つ目の指標は知識領域間の分散である。各国の HIP 出版数を知識領域ごとに数え (表 3.27)、知識領域間の変動係数を算出した (表 3.25)。この結果から各国の HIP 出版数が一部の知識領域に集中している、あるいは、幅広い知識領域に分散しているかを調査した。アメリカ・中国・韓国・日本の各国の知識領域間の変動係数はそれぞれ 0.752、0.486、0.856、0.773 であり、中国が低い値、アメリカ・韓国・日本が高い値を示した。したがって、HIP 出版数は中国では幅広い知識領域に分散、一方でアメリカ・韓国・日本は一部の知識領域に集中していることが示唆された。実際に、中国の HIP 出版数 1 位の研究機関 MOE は複数の知識領域に HIP 出版数が分散しており、#2-1-3 ハロゲン化酸化ビスマスでは 21 本、#3-1-3SnO₂ 複合材では 14 本、#3-2-3 酸化銅では 12 本の HIP を出版していた。一方、韓国の HIP 出版数 1 位の研究機関 Yeungnam University の出版 HIP は全て #3-1-3SnO₂ 複合材に属しており、HIP 出版が一部の知識領域に偏っていた。

表 3.25 各国の知識領域・研究機関における HIP 出版数の変動係数

国	変動係数	
	研究機関	知識領域
アメリカ	1.085	0.752
中国	1.681	0.486
韓国	0.907	0.856
日本	1.411	0.773

表 3.26 各国の HIP 出版数上位 5 研究機関

国	出版数	機関 (大学ランキング順位) 赤文字: 上位 100 研究機関
アメリカ	14	Princeton University (7)
	12	Massachusetts Institute of Technology (5)
	6	University of Wisconsin (43)
	5	University of Colorado (100), University of Illinois (37)
中国	48	Ministry of Education
	43	Chinese Academy of Sciences
	21	Dalian University of Technology (601-800)
	20	Central China Normal University (501-600)
	17	Wuhan University (401-500)
韓国	10	Ewha Womans University (501-600)
	9	Yeungnam University (601-800)
	6	Pohang University of Science and Technology (137)
	3	Chonbuk National University
	2	Inha University (601-800)
日本	15	Osaka University (201-250)
	11	Japan Science and Technology Agency
	3	The University of Tokyo (46)
	2	Tokyo Institute of Technology (251-300)
	1	Kyoto University (74), Nara Institute of Science and Technology, National Institute of Advanced Industrial Science and Technology, Tokyo Chemical Industry Co., Ltd, Toyota Central R&D Labs., Inc., The University of Electro-Communications, University of Tsukuba (401-500), University of Yamanashi (801-1000)

表 3.27 各国の知識領域別 HIP 出版数

国	知識領域			
	#2-1-3	#3-1-3	#3-2-3	#3-3-1
アメリカ	10	7	8	44
中国	83	55	69	16
韓国	2	16	1	6
日本	1	3	2	11

3.4. 考察

本章では、3.3 の結果から提案手法の目的である複合可能な材料と用途の組み合わせの予測を達成できたか議論する。また、3.3 の結果に至った原因を分析し、日本のイノベーション創出の促進に向けた課題について議論する。

3.4.1. 複合可能な知識領域の組み合わせの予測

既存材料の用途開発には、複合可能な材料知識領域と用途知識領域の組み合わせの予測が有用である(Nakamura, 2015)。また、提案手法で定義した未成熟・成長知識領域は他の知識領域と複合する余地があることが提案手法で明らかになった。以上の観点から、いずれかが未成熟・成長知識領域である材料知識領域と用途知識領域の組み合わせが複合可能であると仮定した。本節では、この仮定を検証するために各 3 分野で出版された論文数の増加率を WoS で調査し、上記で述べた知識領域の組み合わせの複合を確認する。

- **FET**

用途知識領域である#1-2-1 イオン FET と材料知識領域かつ未成熟・成長知識領域である#1-3-3 黒りんが複合可能であると推測した。検索語を”field effect transisto* ion black phosphorus” (*はワイルドカード)に設定し、論文書誌情報抽出時(2016/6/27)とその 2 年後(2018/6/26)の論文数を調査した結果、9 本から 70 本に急増していた。したがって、#1-2-1 イオン FET と#1-3-3 黒りんの知識領域の複合が確認できた。

- **EDLC**

用途知識領域かつ未成熟・成長知識領域である#2-2-3 着用キャパシタと材料知識領域かつ未成熟・成長知識領域である#3-3-1MOF が複合可能であると推

測した。検索語を”(supercapacit* OR “electrical double layer capacit*“ OR edlc OR ultracapit*) wearable mof” (*はワイルドカード)に設定し、論文書誌情報抽出時(2018/11/28)とその2年後(2020/11/27)の論文数を調査した結果、10本から31本に急増していた。したがって、#2-2-3 着用キャパシタと#2-1-2 高分子-グラフェンの知識領域の複合が確認できた。

- 光触媒

用途知識領域かつ未成熟・成長知識領域である#3-3-1 クロスカップリングと材料知識領域である#3-1-3SnO₂ 複合材が複合可能であると推測した。検索語を”photocatal* radical transfer sno2 composit*” (*はワイルドカード)に設定し、論文書誌情報抽出時(2018/11/28)とその2年後(2020/11/27)の論文数を調査した結果、3本から10本に急増していた。したがって、#3-3-1 クロスカップリング反応と#3-1-3SnO₂ 複合材の知識領域の複合が確認できた。

上記の3分野の結果より、提案手法によって複合可能な材料と用途の組み合わせを予測することができた。

次に、EDLC 分野と光触媒分野の用途知識領域間のコサイン類似度を複合材料知識領域と単体材料知識領域の場合で比較する。EDLC 分野において2016年にコサイン類似度が0.42以上である組み合わせの割合は単体材料知識領域が4%、複合材料知識領域が13%であった。また、光触媒分野では2018年にコサイン類似度が0.42以上である組み合わせの割合は単体材料知識領域が13%、複合材料知識領域が17%であった。したがって、複合材料知識領域は単体材料知識領域よりも高いコサイン類似度を示す傾向があり、複合材料知識領域の方が用途知識領域との関係が強いことが示唆された。この結果は複合材料の応用性の高さを示しており、複合材料の開発の重要性を表している。

3.4.2. 日本のイノベーション創出の促進に向けた課題

各国の研究活動方針を比較するため、提案手法では各国の出版論文のうち未成熟・成長知識領域に属する割合を比較した。その結果、中国は高い値、日本は低い値、アメリカと韓国は中間の値を示した。また、各国の政策活動を比較した結果、各国が重点を置く知識領域が異なっていた。本節では、本結果に至った背景を議論する上で本結果から新しく得られた知見について解説する。

未成熟・成長知識領域において優勢である中国は、成熟知識領域の研究活動では他国からの知識を吸収することで投資を抑え、その分未成熟・成長知識領域の研

究活動に先回りして先行投資するハイリスクハイリターンな戦略を採用している(Xu, 2019)。一方、未成熟・成長知識領域に対して劣勢である日本は、未成熟・成長知識領域だけではなく成熟知識領域の研究活動にも投資を続行するローリスクローリターンな戦略を採用している(Nikkei Asian Review, 2020)。未成熟・成長知識領域に先行投資している国は将来的に未成熟・成長知識領域においてより優勢となり、今後の研究力の差は拡大し続けることが予測される。以上より、未成熟・成長知識領域に属する出版論文の割合の背景には各国の研究開発に対する投資戦略の違いがあり、提案手法を用いてそれを反映させることができた。

上記の観点から、技術の先進国であった日本が将来的にはその地位を保つことが危ぶまれている。以下、日本の国際的な地位の時系列を振り返る。1960~90年代のアジアでは先進国である日本・韓国・中国などが研究開発を行い、後進国に組み立てなどの量産化産業を渡していく分業の形「雁行型」が取られていた。しかし、近年では産業のデジタル化とともにこの分業の形が変化し始めた。インターネットが新興国にも浸透し、世界中で知識や技術を持ち寄って連携することが可能になったためである。これにより研究開発の形がどの国でも先進国を上回る技術が生まれやすい「並行型」にシフトし始めた(日本経済新聞, 2019)。

しかし、上で述べたように日本は未成熟・成長知識領域において劣勢であり、その背景には日本の成熟知識領域に対する継続的な投資がある。これは研究開発の形が「並行型」から更に変化した「独立型」(未成熟・成長知識領域に重点的に取り組む国もあれば、継続的に成熟知識領域の強化にも取り組んでいる国もあり、国によって目指す方向が異なる研究開発の形)に変化していることを示唆している。なお、「雁行型」・「平行型」・「独立型」のイメージを図 3.6 に図示した。

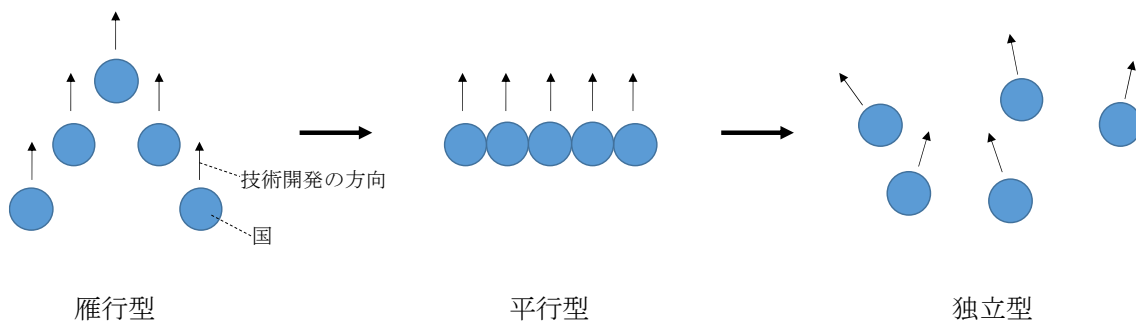


図 3.6 「雁行型」・「平行型」・「独立型」のイメージ

次に、各国の研究力の配分方針の結果について議論する。提案手法では、知識領域と研究機関における HIP 出版数の分散を算出した(表 3.7; 表 3.16; 表 3.25)。これらの結果を踏まえてアメリカ・中国・韓国・日本の研究力の配分方針を分散型、あるいは、一極集中型に定義した(表 3.28)。その結果、アメリカと日本は研究機関において分散型で知識領域においては一極集中型、中国と韓国は研究機関においては一極集中型で知識領域においては分散型と定義された。以下、この結果に至った原因を分析した上で、日本の研究力の配分方針の課題を分析する。

表 3.28 各国の研究力の配分方針

国	研究力の配分方針	
	研究機関	知識領域
アメリカ	分散型	一極集中型
中国	一極集中型	分散型
韓国	一極集中型	分散型
日本	分散型	一極集中型

まず、知識領域における HIP 出版数の分散は、各国の政策活動や社会背景が大きく影響すると考えた。例えば、中国では科学技術政策である「中国製造 2025」が打ち出されたが、この政策では得意分野(グラフェンなど)だけではなく弱点分野(半導体など)も強化対象に含まれている。一方、3.3.2.5 で述べたように日本はノーベル賞受賞分野など自国の得意分野に重点を置く傾向がある。例えば、幹細胞分野の研究において日本は ES 細胞より iPS 細胞に焦点を当てており、これ

は山中伸弥の iPS 細胞がノーベル賞を受賞したことが大きく影響している(毎日新聞, 2016)。したがって、HIP 出版数が一部の知識領域に集中している国は、その国の得意分野に研究の重点を置く傾向があると考えられる。

次に、研究機関における HIP 出版数の分散は、研究予算が大きく影響すると仮定した。なぜならば、研究予算と論文の生産量は 1 に近い相関係数があり(文部科学省, 2019)、研究予算は研究機関によって大きく異なるためである。各国の研究機関の研究予算の分散は、アメリカは比較的小さいが中国は一部の研究機関に大きく偏っている。この背景に各国の研究機関の収入源の違いがある。

アメリカの研究機関の主な収入源は投資、グラント、学費、寄付金である一方(Stanford University, 2018)、中国の研究機関の主な収入源は政府交付金である(JSPS, 2017)。中国の大学ランキング上位 2 校の北京大学と清華大学は、研究費ランキングにおいても上位 2 校を占めており、研究予算・研究成果共に他の大学と大きな差をつけている(SPC)。このように、研究予算の収益構造上中国の研究機関の研究予算には大きな偏りが生じやすく、結果として HIP 出版数が一部の研究機関に集中したと推論できる。

以上の観点のもと、今後の日本の研究力の分配方針として、研究予算を幅広い知識領域に分散させることが重要であると考えられる。現在の日本の研究予算は一部の知識領域に偏っていることを上記で述べたが、これは長期的なイノベーション創出を阻む危険性があるためである。

多様な分野から輩出される多様な知識を基盤に知識は複合され、そこからイノベーションは創出される。例えば、物理学と生物学の複合から誕生した分子生物学がその例に当たる。分子生物学とは、物理学の分子構造解析手法によって生物学の生命現象を解明する分野であり、有名な例ではノーベル賞を受賞した DNA の二重らせん構造の発見がある(Watson, 1953)。この二重らせん構造の発見は生物分野の DNA に関する知識と物理学の X 線構造解析手法の複合によって実現した。

このように、知識の複合は重大なイノベーションを創出する場合があります、幅広い知識を蓄積させながらこれらを複合することは長期的なイノベーション創出において大切である(文部科学省, 2019)。このように研究予算の一極集中は長期的な知識の複合を難しくし、将来的にイノベーション創出が盛んな未成熟・成長知識領域にて日本がより劣性になることが危惧される。

一方、アメリカは知識の蓄積活用したイノベーション創出に長けている。アメリ

カでは産学連携や組織連携が日本より盛んであり(荒磯, 2014)、知の流動によるイノベーション創出システムを構築している。しかし、アメリカと同様に日本も知識の蓄積には十分な厚みがあり、特に過去の知識の蓄積が重要な材料分野ではこれの活用が望まれている。

以上より、提案手法の結果から日本の研究投資は幅広い知識領域に研究予算を分散させることが課題であると判断した。

3.5. 本章のまとめ

本節では、本章の要点とそれを踏まえた次章への動機を述べる。

提案手法の目的は複合可能な知識領域の組み合わせの予測であった。提案手法では3分野(FET・EDLC・光触媒)において各分野の研究活動・商業活動・政策活動を俯瞰した。その結果をもとに複合可能な材料・用途知識領域の特定と各国の研究活動方針の比較を行った。

提案手法は次の4段階で行った。1段階目では、各分野の論文引用ネットワークをクラスタリングし、研究活動に存在する知識領域を把握することで研究活動を俯瞰した。また、各知識領域の特徴語をもとにこれらを材料知識領域、用途知識領域に分類した。2段階目では、マトリクスを用いて商業化が急速に進んでいる知識領域を特定することで商業活動を俯瞰した。3段階目では、ヒートマップを使用して各知識領域間の関与性の強さを算出した。また、知識領域間の関与性の時系列変化を観察し、急速に関与性が変化している知識領域の組み合わせを特定した。4段階目では、各国が重点を置いている知識領域を比較することで政策活動を俯瞰した。

1~3段階目の結果から、複合材料知識領域は用途知識領域と強い関係を持つ傾向が明らかになった。また、材料知識領域と用途知識領域の組み合わせのうちいずれかが未成熟・成長知識領域である組み合わせに着目することで、複合する知識領域を特定することに成功した。4段階目の結果からは、中国と韓国は未成熟・成長知識領域の強化に重点的に取り組んでいることが明らかになった。

以上の結果から、提案手法では複合材料知識領域の強化が課題であると結論づけた。これを踏まえて本節では、各国の複合材料の研究活動に対する集中度合いを比較する。提案手法で抽出したEDLCと光触媒の論文のうち”composit*” (*はワイルドカード)を含む割合を算出したところ、中国と韓国は高い値を示した

が日本は低い値を示した(表 3.29)。それぞれの値は、中国は EDLC で 33.7%、光触媒で 33.0%、韓国は EDLC で 28.5%、光触媒で 32.7%であった。一方、日本は EDLC で 21.5%、光触媒で 26.7%であった。したがって、未成熟・成長知識領域において優勢である中国と韓国は複合材料の研究開発に注力しており、日本は複合材料の研究開発に遅れをとっていることが示された。

このため、未成熟・成長知識領域にて今後劣勢になることが危惧されている日本は、複合材料に関する研究活動の強化が課題であることが推測できる。そこで次章では、複合材料の研究活動の効率化に向けた手法を提案する。

表 3.29 各国の出版論文のうち composit*を含む割合

国	知識領域	
	EDLC	光触媒
アメリカ	23.7%	23.3%
中国	33.7%	33.0%
韓国	28.5%	32.7%
日本	21.5%	26.7%

4. 複合可能な材料と材料の組み合わせの予測

本章では、1つ目の手法である複合可能な材料と材料の組み合わせの予測のための手法を提案する。また、本章は PICMET 2018 にて発表した内容を基に記載している(Fujisue, 2018)。

4.1. 先行研究

1.1 で説明したように、材料分野においても論文数の急増に伴う知識の細分化が進んでいる。しかしその一方で、細分化された知識の複合による新規知識の創出が行われており、材料分野では複合材料がその例に当たる。近年では、新規材料の開発の効率化に向けてデータを活用する取り組み(MI)が行われている。MIでは既存の材料の物性データから新規複合材料の物性値を予測することで、複合可能な材料の組み合わせを効率的に検出している。また、他の分野ではリンク予測を活用して複合可能な知識を予測している。本節では、このような取り組みが行われている背景を説明した上で、MI またはリンク予測を用いた複合可能な知識の組み合わせの予測に関する先行研究を紹介する。

4.1.1. 材料分野×情報処理技術

研究活動の効率化に向けて、生物学や医学などの分野では膨大な実験データ(ビッグデータ)が活用されている(Saeyns, 2007; Humphreys, 1998)。このような取り組みは「科学の第4パラダイム」と呼ばれている(Hey, 2009)。パラダイムとは、実験や観察の結果から得られた新しい法則をモデル化することである(Kuhn, 1962)。第4パラダイムは最新のパラダイムであり、以下に示す4つのパラダイムを経て登場した(Hey, 2009)。

第1パラダイムとは経験記述的手法である。例えば、宇宙が地球を中心に動いている法則である天動説は、空が動いていることを観察した経験から導かれた。第2パラダイムとは理論科学的手法である。実験結果の分析によって法則を式で表す手法を指し、例えばニュートンの第2の運動の法則がこれに当たる。物体の加速度は加えた力の量に比例して質量に反比例するという法則を $F = ma$ (F : 力、 m : 物体の質量、 a : 物体の加速度) という式で表した。第3パラダイムとは計算科学的手法である。数式で表せない複雑な法則をシミュレーショ

ンで予測・再現する手法を指し、ハリケーンが発生する時期や場所を予測するシミュレーションもその例である。そして、第 4 パラダイムはビッグデータの予測手法である。例えば、SNS のデータから HIV 感染者を予測する取り組みがその例に当たる(Young, 2015)。第 4 パラダイムの登場によって過去から蓄積された膨大なデータを基にした将来の予測が可能になった。

この第 4 パラダイムを材料分野に応用したものが MI であり(Rodgers, 2006)、材料分野の研究活動の効率化を目的としている。MI が登場した背景には、新規材料の開発から実用化までに 20 年以上かかると言われているように(NRC, 2011)、材料分野の研究活動における莫大なコストの削減という課題がある。従来の新規材料開発では試行錯誤による実験が行われていたため、時間的にも金銭的にも高いコストを要していた。そこで、材料分野では研究活動のコスト削減に向けた解決策の 1 つとして MI を採用している。

近年では、実際に MI によって高性能な新規材料の開発例が報告されている。有名な例の 1 つが MIT と Samsung が開発した Li イオン電池の固体電解質材料である(Mo, 2012)。従来の電池材料(液体、ゲルなど)は劣化や発火性などが問題視されていたため、固体電池材料の開発が精力的に行われていた。その状況下でデータから設計されたこの新材料は大きな反響を呼び、MI が脚光を浴びるきっかけの 1 つとなった。また、京都大学らが開発した Li イオン電池正極材料も MI の好事例であり(Nishijima, 2014)、この材料は従来の材料よりも 5 倍以上の寿命を持つことが報告されている。

このように、MI は新しい分野であるにも関わらず高性能な材料を開発する段階まで急発展を遂げてきた。しかし、依然として課題は残っている。その 1 つが MI に適さない材料が存在することである。例えば、高分子はその物性値の数値化が難しいため MI への適用が難しい。そのため MI に適用可能な材料の拡大が課題とされており(加藤, 2018)、現状の MI では本来開発可能な材料が見落とされる可能性を危惧する必要がある。

1.2 で述べたように、近年では CFRP のような斬新な材料の組み合わせの複合が重要視されている。MI を用いて多種の材料から複合可能な材料同士の組み合わせの予測が可能になれば、効率的に斬新かつ複合可能な材料の組み合わせを特定することが期待できる。

4.1.2.材料分野×ネットワーク科学

研究者は自分の専門に近い知識に着目する傾向がある(Rzhetsky, 2015)。しかし、高インパクトな研究は斬新な知識の組み合わせから誕生することが多いため、研究者は自分の専門以外にも知見を広げることが重要である。そこで、材料分野では論文書誌情報から研究活動の俯瞰図を作成し、研究者に広い視野を提供する取り組みが行われている。以下に2つの例を挙げる。

1つ目は、論文の引用ネットワークの構造変化を基にした研究活動のトレンドの予測である(Asatani, 2018)。成長方向の先端にある論文はその後被引用数が増加し、更にその論文の頻出単語を含む論文が多く出版されていた。成長方向の先端にある論文に着目することで、その後の成長領域を予測することに成功している。2つ目は、論文の引用ネットワークの時系列変化を基にした被引用数増加論文の予測である(Sasaki, 2016)。ナノカーボン分野の論文書誌情報を基に被引用数が増加する論文の予測モデルを構築した結果、引用数上位5%の論文を高い精度で予測することに成功している。

上記の例のように、材料分野の論文の引用ネットワークの時系列変化から研究活動のトレンドの予測が行われている。研究活動のトレンドを研究者に公開することでトレンドの先端の知識領域に研究者の注目を集めることができ、結果的に材料分野の発展の促進につなげることが期待される。

4.1.3.他分野×リンク予測

多数の候補から適切な組み合わせを検出する手法の1つにリンク予測がある。リンク予測とは、ノードとリンクで構成されるネットワークの構造変化からリンクが発生する位置を予測する手法である。

リンク予測は自動車、生物、マーケティングなどあらゆる分野で応用されている。論文書誌情報を用いたリンク予測の例では、論文の引用ネットワークのリンク予測を基にした航空-自動車分野間で移転可能な技術の検出、単語の共起ネットワークのリンク予測を基にした異なる器官の治療に適用可能な材料・技術の検出、などが報告されている(Nakamura, 2015; Yamano, 2016)。また、共著ネットワークのリンク予測からは有望な共同研究者の組み合わせの予測が行われている(Lande, 2020)。実験データを用いたリンク予測の例では、相互作用を持つタンパク質のネットワークのリンク予測をタンパク質機能の予測に応用した例が報告されている(Marcotte, 1999)。Web データを用いたリンク予測の例で

は、消費者の web 上の行動データ分析に基づく商品のレコメンド機能、SNS の友人関係ネットワーク分析に基づくユーザーのレコメンド機能などの活用例が報告されている(Menon, 2011)。

リンク予測の手法はいくつかあり、以下に 4 つの例を挙げる(鹿島, 2012)。

- ノードに関連する情報に基づくリンク予測

ノードに関連する情報とは、そのノード自身が持っている情報である。例えば、SNS におけるユーザーの個人情報(住所、年齢、職業など)やタンパク質の相互作用ネットワークにおけるタンパク質の配列情報がそれに該当する。タンパク質の相互作用ネットワークのリンク予測の 1 つでは、片方のタンパク質がある特徴的な部分構造を持ち、もう一方がそれに作用する部分構造を持つ場合、それらは相互作用を持つ可能性が高いと判断される。

- ネットワーク構造に関連する情報に基づくリンク予測

ネットワーク構造に関連する情報とは、ノード周辺のリンク構造を捉えた情報を指す。例えば、SNS におけるユーザーのフォロー/フォロワー情報やタンパク質相互作用ネットワークにおけるタンパク質同士の相互関係がそれに該当する。SNS のリンク予測の 1 つでは、ある 2 人のユーザーが多数の共通のフォロー/フォロワーを持つとき、その 2 人はフォロー/フォロワーである可能性が高いと推測される。なお、ネットワーク構造の指標には、Common Neighbor (CN) (Lorrain, 1971)、Jaccard Coefficient (JC) (Jaccard, 1901)、Resource Allocation Index (RA) (Zhou, 2009)、Adamic/Adar Index (AA) (Adamic, 2003)、Preferential Attachment (PA) (Liben-Nowell, 2004)などがある。

- ノードに関連する情報とネットワーク構造に基づく情報に基づくリンク予測

上記 2 つのリンク予測手法では、ノードに関連する情報あるいはネットワーク構造に関連する情報のいずれかに基づいている。しかし、ネットワークは通常ノードに関連する情報とネットワーク構造に関連する情報の両方を持つ。例えば、タンパク質の相互作用ネットワークでは、個々のタンパク質(ノード)はタンパク質自身の情報(ノードに関連する情報)とタンパク質の相互作用(ネットワーク構造に関連する情報)の両方を有している。なお、ノードとネットワーク構造の双方を用いる指標には Common Neighbors Soundarajan Hopcroft (CNSH) (Soundarajan, 2012)、Resource Allocation Index

Soundarajan Hopcroft (RASH) (Soundarajan, 2012)、Within Inter Cluster (WIC) (Valverde-Rebaza, 2012)などがある。

- ネットワーク埋め込みを用いたリンク予測
ネットワーク埋め込みとは、ネットワーク情報をベクトルに変換して空間にマッピングすることを指す。ネットワーク埋め込みを用いたリンク予測では、マッピングされた 2 つのノードの距離からノード間にリンクが発生する可能性を算出する。なお、ネットワーク埋め込みに用いるアルゴリズムには、Node2vec(Grover, 2016)、LargeVis(Tang, 2016)、LINE(Tang, 2015)、GraphWave(Donnat, 2017)などがある。

4.2. 提案手法

本節では、前節で紹介した先行研究の課題と提案手法の目的と手順を述べる。先行研究では、多種の材料から複合可能な材料の組み合わせの予測が課題とされている。この課題の解決を提案手法の目的とし、目的達成に向けた提案手法の具体的な手順を説明する。

4.2.1. 提案手法の目的

近年、PB とセルロースのような全く性質が異なる斬新な材料同士の複合が重要視されている。例えば、CNT の開発に携わった世界トップレベルの研究者である遠藤守信は CNT と高分子材料など斬新な材料の組み合わせの複合に取り組んでいる(Wang, 2017; Takeuchi, 2018; Kitano, 2019)。

しかし、斬新かつ複合可能な材料の組み合わせを新しく発見することは非常に難しい。複合材料の開発には既存材料を組み合わせる必要があるが、材料の種類数は膨大であり、材料データベース MatWeb には 2020 年 12 月現在約 14 万種の材料のデータが保持されている(MatWeb)。そのため、材料の組み合わせの数は天文学的数字であり、その中から複合可能な組み合わせを検出することは極めて困難である。

このように、複合材料の新規開発の難しさから、複合材料の開発においても MI が活用されるようになった。しかし、4.1.1 で述べたように材料の中には MI に適さないものも存在する。したがって、MI において分析対象に含まれない材料と複合可能な材料が存在する場合、その材料の組み合わせは MI によって検出

されない点が問題とされている。提案手法では、複合可能な材料と材料の組み合わせの予測を、論文中で共起する材料単語の予測と捉えてモデルを構築することで、上記の問題を解決すると考えた。以下、その根拠を述べる。

物性情報を用いる従来の MI では、材料からその物性情報を取得する必要がある。しかし、高分子材料など材料からその物性情報を取得することが難しい材料も存在するため、MI による物性予測が可能な材料には制約があった。一方、論文書誌情報から材料の情報を取得する場合、論文に記載されている全ての材料の情報が抽出可能である。

また、論文書誌情報は、物性情報とは異なり研究者の行動や判断に関する情報を含んでいる。例えば、複合材料に関する論文には、研究者が選択した複合材料を構成する材料の組み合わせが掲載されている。提案手法の目的は研究者が今後複合する新規材料の組み合わせの予測であり、材料由来の物性情報よりも研究者の行動由来の論文書誌情報の方が提案手法で定義する情報として適切であると考えられる。実際に、材料に関する既存知識のネットワークから新規熱伝導材料を予測することに成功している先行研究が存在していることから、新規材料の予測において論文書誌情報が有効であると考えられる (Tshitoyan, 2019)。

論文書誌情報上で複合材料は”Graphene-Polyaniline”や”TiO₂/graphene”のように表記されており (Sha, 2017; Trapalis, 2015)、複合材料の構成材料は論文上で共起している。したがって、共起する材料単語の組み合わせを予測することで、複合可能な材料単語の組み合わせの特定が可能であると考えられる。4.1.3 で説明したようにリンク予測は単語の共起予測における有用性が実証されている。提案手法では、論文に記載されている材料単語をノード、それらの共起関係をリンクとした共起ネットワークのリンク予測によって、複合可能な材料の予測が可能であると考えた。

4.2.2. 提案手法の概要

提案手法の手順は以下の 4 段階である (図 4.1)。

4.2.3. 複合材料に関する論文の抽出

4.2.4. 論文から材料単語の抽出

4.2.5. 材料単語の共起ネットワーク作成

4.2.6. リンク予測

以下、各手順の詳細を説明する。

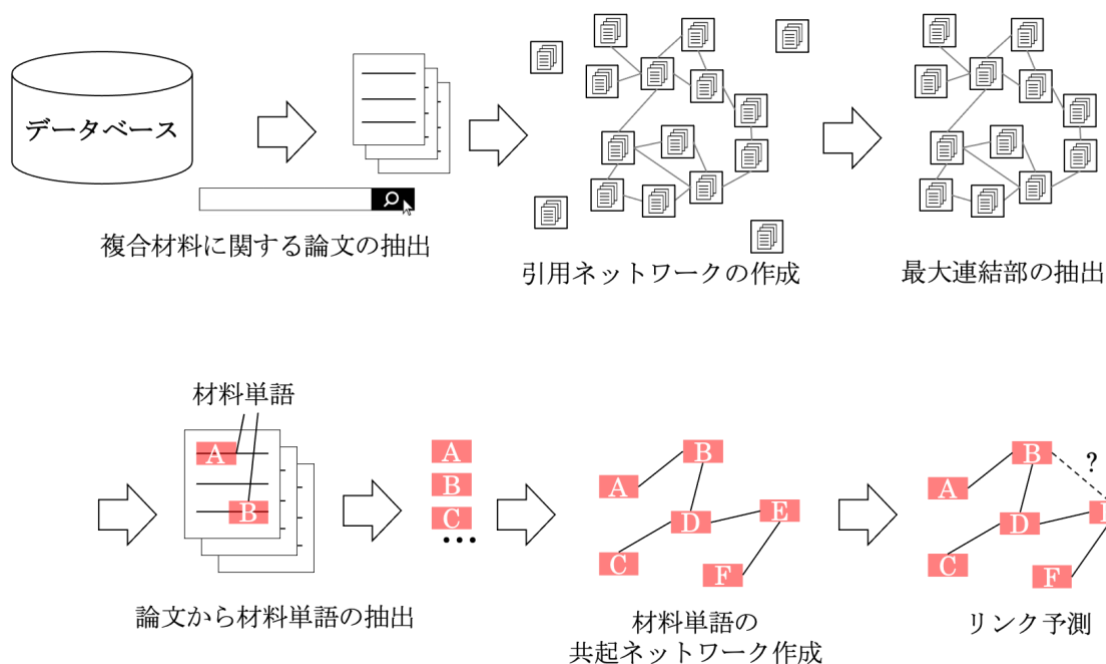


図 4.1 複合可能な材料の予測の手順

4.2.3. 複合材料に関する論文の抽出

タイトル、アブストラクト、キーワードのいずれかが検索語”composite materia*”(*はワイルドカード)を含む論文を ISI が運営する論文データベース SCI から抽出した。データベースのアクセスには、Clarivate Analytics が管理している論文引用検索サービス WoS を使用した。また、複合材料と関連が弱い論文を除去するため、抽出した論文の引用ネットワークの最大連結部に含まれる論文のみを分析対象とした。

4.2.4. 材料単語の抽出

抽出した論文書誌情報から頻出語を収集し、それらの中から出現論文数上位 100 材料単語(以下「100 材料単語」と称する)を抽出した。頻出度が低い材料単語は他の材料単語と共起が少ない可能性が高いため、提案手法では頻出度が高い材料単語のみを分析対象とした。

4.2.5.材料単語の共起ネットワークの作成

4.2.3 で抽出した論文のうち 100 材料単語同士の組み合わせ(以下「材料単語ペア」と称する)それぞれが共起する論文数を数えた。各 100 材料単語をノード、共起関係をリンクとして材料単語の共起ネットワークを作成した。

4.2.6.リンク予測

提案手法で行うリンク予測において、3 種のトレーニング期間(TRP1: 20010~2012 年、TRP2: 2011~2012 年、TRP3: 2012 年)と 1 種のテスト期間(TSP: 2012~2015 年)を設定した(表 4.1)。リンク予測に用いるテスト期間は通常 5~10 年程度であることが多いが(Dunlavy, 2011; Acar, 2009)、提案手法ではそれより短いテスト期間を設定した。1.1.1 で言及したように論文増加率の向上に伴い研究分野の変化速度が年々加速しているため、提案手法ではより短い期間で研究分野の変化を分析することが適切であると考えた。

表 4.1 各トレーニング期間とテスト期間の定義

ID	期間
TRP1	2010/1/1~2012/12/31
TRP2	2011/1/1~2012/12/31
TRP3	2012/1/1~2012/12/31
TSP	2013/1/1~2015/12/31

リンク予測の手順は以下の①~⑤である。各手順の詳細を下記に記す。

- ① トレーニング期間開始時と終了時の材料単語共起ネットワークの作成
- ② トレーニング期間中にリンクが発生した材料単語ペアの特定
- ③ 材料単語ペアのスコア算出
- ④ 各スコアをカットオフとした場合の真陽性・偽陰性・偽陽性・真陰性の数から AUC と平均精度を算出
- ⑤ 8 種の指標と 3 種のトレーニング期間の各組み合わせ(合計 24 組)それぞれにおいて高い予測精度を示すカットオフの特定

手順①では、各トレーニング期間の開始時以前と終了時以前に発行された論文書誌情報を用いて材料単語共起ネットワークを作成した。例えば、テスト期間

TRP1 では 2009 年 12 月 31 日以前に出版された論文と 2012 年 12 月 31 日以前に出版された論文書誌情報をもとに材料単語共起ネットワークを作成した。

手順②では、手順①で作成した材料単語共起ネットワークの差分からリンクが発生した材料単語ペアを特定した。

手順③では、ネットワーク構造指標から各材料単語ペアのスコアを算出した。小規模のネットワークのリンク予測では、4.1.3 で挙げた指標のうちネットワーク構造に関連する指標が適切である(Cao, 2019)。そのため、提案手法のリンク予測ではネットワーク構造に基づく 8 種の指標(CN, JC, RA, AA, PA, CNSH, RASH, WIC)指標を用いた。

以下、ネットワーク構造に基づく指標の定義と図 4.2 に示す 6 個のノード(x, y, z₁~z₄)のネットワークの場合における x と y の各指標のスコアの算出方法を説明する。

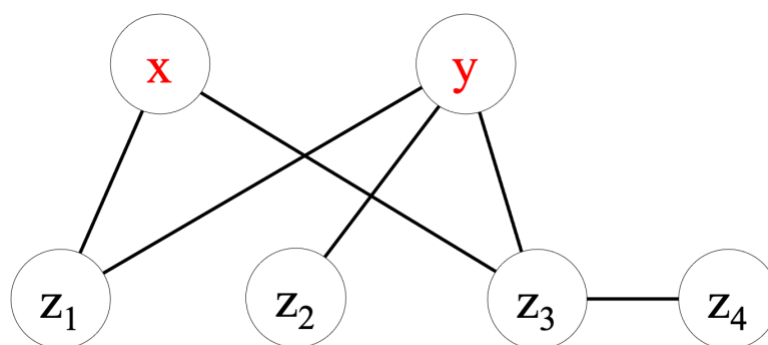


図 4.2 ネットワークの例

CNとは、ある2つのノードの両方とリンクを持つノードの数であり (Newman, 2001)、友人関係で例えると、「共通の友人が多い程、その2人も友人である可能性が高い」と考える理論である。x, y の隣人ノード数をそれぞれ $\Gamma(x)$ 、 $\Gamma(y)$ とすると、x と y の CN(CN_{xy})は式(4.1)で表される(Bai, 2011; Kashima, 2006)。図 4.2 に示すネットワークの場合、x, y の CN は z₁, z₃ の 2 個である。したがって、図 4.2 に示すネットワークの場合、CN_{xy}=2 となる。

$$CN_{xy} = \Gamma(x) \cap \Gamma(y) \dots (4.1)$$

JC とは、 x, y いずれかの隣人ノードのうち x, y の CN が占める割合であり (Jaccard, 1901)、友人関係で例えると、「友達の多くが重なるならば、その 2 人も友人同士である可能性が高い」と考える理論である (鹿島, 2012)。 x, y の $JC(JC_{xy})$ は式(4.2)で表される。図 4.2 に示すネットワークの場合、 x または y の隣人ノードは z_1, z_2, z_3 の 3 個、 x, y の CN は z_1, z_3 の 2 個である。したがって、 $JC_{xy} = \frac{2}{3}$ となる。

$$JC_{xy} = \frac{|\Gamma(x) \cap \Gamma(y)|}{|\Gamma(x) \cup \Gamma(y)|} \dots (4.2)$$

RA とは、各 CN の隣人ノード数の逆数の和であり (Zhou, 2009)、友人関係で例えると、「人付き合いの悪い人を共通の友達に持つ 2 人は友達である可能性が高い」と考える理論である (鹿島, 2012)。 x, y の $RA(RA_{xy})$ は式(4.3)で表され、重みの大きさは隣接ノードが持つ隣接ノードの数に反比例する。そのため、少数の隣接ノードを持つノードには大きな重みが割り当てられる。図 4.2 に示すネットワークの場合、 x, y の CN は z_1, z_3 であり、 z_1, z_3 それぞれの隣人ノード数は x, y の 2 個、 x, y, z_4 の 3 個である。したがって、 $RA_{xy} = \frac{1}{2} + \frac{1}{3} = \frac{5}{6}$ となる。

$$RA_{xy} = \sum_{u \in \Gamma(x) \cap \Gamma(y)} \frac{1}{|\Gamma(u)|} \dots (4.3)$$

AA とは、各 CN の隣人ノード数の対数の逆数の和であり (Adamic, 2003)、友人関係で例えると、「人付き合いの悪い人を共通の友達に持つ 2 人は友達である可能性が高い」と考える理論である (鹿島, 2012)。 x, y の $AA(AA_{xy})$ は式(4.4)で表される。AA は RA と同様に図 4.2 に示すネットワークの場合、 x と y の CN は z_1, z_3 の 2 個、隣人ノードは z_1, z_2, z_3 の 3 個である。したがって、 $AA_{xy} = \frac{1}{\log 2} + \frac{1}{\log 3}$ となる。

$$AA_{xy} = \sum_{u \in \Gamma(x) \cap \Gamma(y)} \frac{1}{\log|\Gamma(u)|} \dots (4.4)$$

PA とは、2 つのノードそれぞれの隣人ノード数の積であり (Liben-Nowell, 2004)、友人関係で例えると、「新しいリンクにノード x が含まれる確率は隣人ノードの数に比例する」という前提に基づく理論である。 x, y の PA(PA_{xy}) は式(4.5)で表される。PA の理論は図 4.2 に示すネットワークの場合、 x, y の隣人ノードはそれぞれ z_1, z_3 の 2 個、 z_1, z_2, z_3 の 3 個である。したがって、 $PA_{xy}=2 \times 3=6$ となる。

$$PA_{xy} = |\Gamma(x)||\Gamma(y)| \dots (4.5)$$

CNSH とは、CN にコミュニティ属性の情報を加えた指標である (Soundarajan, 2012)。コミュニティ属性とは、ノードをいくつかのコミュニティに分割した場合に各ノードが所属するコミュニティを指す。 x, y の CNSH($CNSH_{xy}$) は式(4.6)で表され、このとき $f(u)$ は u が x, y と同じコミュニティに属している場合は 1、属していない場合は 0 となる。図 4.2 に示すネットワークの場合、 x, y と共通隣人ノード z_1, z_3 が全て同じコミュニティに所属していると仮定すると $f(z_1)=1, f(z_3)=1$ であるため、 $CNSH_{xy}=2+1+1=4$ となる。

$$CNSH_{xy} = |\Gamma(x) \cap \Gamma(y)| + \sum_{u \in \Gamma(x) \cap \Gamma(y)} f(u) \dots (4.6)$$

RASH とは、RA にコミュニティ属性の情報を付け加えた指標である (Soundarajan, 2012)。 x, y の RASH($RASH_{xy}$) は式(4.7)で表され、 $f(u)$ の定義は CNSH の場合と同じである。図 4.2 に示すネットワークの場合、 x, y と共通隣人ノード z_1, z_3 が全て同一のコミュニティに所属していると仮定すると

$f(z_1)=1, f(z_3)=1$ であるため、 $RASH_{xy} = \frac{f(z_1)}{|\Gamma(z_1)|} + \frac{f(z_3)}{|\Gamma(z_3)|} = \frac{1}{2} + \frac{1}{3} = \frac{5}{6}$ となる。

$$RASH_{xy} = \sum_{u \in \Gamma(x) \cap \Gamma(y)} \frac{f(u)}{|\Gamma(u)|} \dots (4.7)$$

WIC とは、 x, y の CN のうち x, y の両方と同じコミュニティに所属する数を、それ以外の数と任意の係数 δ の和で割った値である (Valverde-Rebaza, 2012)。したがって、WIC とは友人関係で例えると、「ある 2 人が同じコミュニティに所属かつ同じコミュニティ内に多く友人を持つとき、2 人は友達である可能性が高い」と考える理論である。 x, y の WIC (WIC_{xy}) は式 (4.8) で表され、このとき $A_{x,y}^W$ は x, y と同じコミュニティに所属する CN、 $A_{x,y}^C$ はそれ以外の CN を指す。 x, y と x, y の CN である z_1, z_3 が全て同一のコミュニティに所属している場合は $A_{x,y}^W=2, A_{x,y}^C=0$ である。任意の定数 δ はここではデフォルト値である $\delta=0.001$ とする時、図 4.2 に示すネットワークの場合、 $WIC_{xy}=\frac{2}{0+0.001}=2000$ となる。

$$WIC_{xy} = \frac{|A_{x,y}^W|}{|A_{x,y}^C| + \delta} \dots (4.8)$$

手順④では、各スコアをカットオフ(陽/陰性の境界値)とした場合のリンク予測の真陽性・偽陽性・偽陰性・真陰性を数え、それらの値から感度(Sensitivity)・特異度(Specificity)・平均精度を算出した(図 4.4) (Yerushalmy, 1947)。

真陽/陰性とは陽/陰性と予測されたものが実際に陽/陰性(予測が正)であるものを指す。これに対して、偽陽/陰性とは陽/陰性と予測されたものが実際には陰/陽性(予測が誤)であるものを指す。感度とは、真陽性を真陽性と偽陰性の和で割った値であり、陽性と予測したもののうち実際に陽性であった割合を示す。提案手法の場合、感度を複合可能な材料の組み合わせ(実現可能な研究テーマ)の発見精度とみなした。特異度とは、真陰性を真陰性と偽陽性の和で割った値であり、陰性と予測したもののうち実際に陰性であった割合を示す。提案手法の場合、特異度を複合不可である材料の組み合わせ(実現不可な研究テーマ)の排除精度とみなした。

座標(感度, 1-特異度)をプロットすることで Receiver Operatorating Characteristic curve(ROC 曲線)を作成し(図 4.5)、ROC 曲線下の面積 Area Under the Curve(AUC)と平均精度(感度と特異度の平均値)を算出した (Metz, 1978)。AUC と平均精度は 0 から 1 までの値を取り、予測精度と比例するため AUC が高いカットオフは予測精度が高いことを意味する (Bradley, 1997)。提案手法では AUC と平均精度をリンク予測精度評価に用いた。

ID	カットオフ		感度 (Sensitivity)	特異度 (Specificity)	平均精度
	陽性	陰性			
①	-	全て	0	1	0.5
②	★≥3	★<3	0	0.66	0.33
③	★≥2	★<2	1	0.66	0.83
④	★≥1	★<1	1	0.33	0.66
⑤	全て	-	1	0	0.5

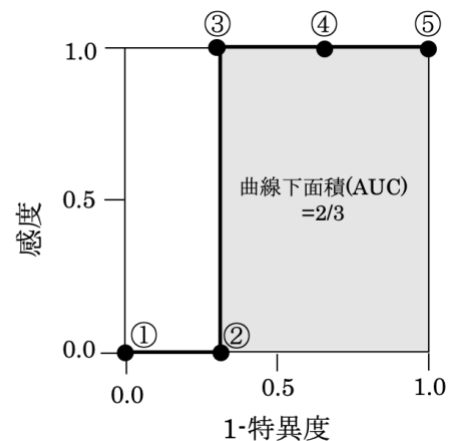


図 4.5 ROC 曲線、AUC の例

4.3. 結果

本節では、4.2 で説明した手法の結果を記載する。

4.3.1. 複合論文に関する論文の抽出

WoS より検索語”composite materia*”を含む 75076 本の論文を抽出した。これらの論文引用ネットワークの最大連結部分には 44430 本の論文が含まれており、提案手法ではこれらを分析対象とした。

4.3.2. 材料単語の抽出

抽出した論文に含まれる材料単語のうち、4.2.4 で定義した 100 材料単語を表 4.2 に示す。これらをカーボン材料、セラミック、金属材料、有機材料の 4 区分に分類した。各区分に分類された材料単語はカーボン材料が 7 個、セラミックが 41 個、金属材料が 10 個、有機材料が 42 個であった。セラミックまたは有機材料に分類された材料単語数が多いため、複合材料の構成材料はセラミックと有機材料が多くを占めていることが示唆された。

抽出した論文のうち材料単語を含む論文数(以下「出現論文数」と称する)は各 100 材料単語間で大きな差が見られた。出現論文数 1 位の材料単語は graphene(出現論文数 8736 本)である一方、出現論文数 100 位は calcium hydroxide(出現論文数 41 本)であった。100 材料単語のうち出現論文数上位 20 材料単語の出現論文数を表 4.3 に、100 材料単語全ての出現論文数を付録の表 B.1 に示す。100 材料単語のうち出現論文数が 1000 本以上、100~999 本、100

本未満の材料単語はそれぞれ 25 個、55 個、20 個であった。また、100 材料単語の出現論文数の平均値は 960 本、中央値は 437.5 本であり、平均値が中央値を大きく上回っていた。したがって、登場論文数には材料単語間で大きな偏りがある(一部の材料単語が多数の論文に出現している)と判断できた。

出現論文数上位 20 材料単語の内訳は金属材料が 9 個、セラミックが 1 個、有機材料が 7 個、カーボン材料が 3 個であった。100 材料単語のうちカーボン材料はわずか 7 個であるが、そのうちの 3 個(graphene, CNT, graphite)は出現論文数が上位 10 位以内であることから、カーボン材料はその種は少ないが複合材料の構成材料として大きな影響力を持っていることが示唆できた。

表 4.2 100 材料単語の材料区分

材料区分	材料単語
カーボン材料	carbon nanotube (CNT), graphite, graphene, diamond, B ₄ C, fullerene, C ₃ N ₄
セラミック	silica (SiO ₂), silane, boron nitride, silsesquioxane, kaolinite, melamine, zeolite, polysiloxane, titanium dioxide (TiO ₂), alumina, aluminum oxide (Al ₂ O ₃), zinc oxide (ZnO), calcium phosphate, barium titanate (BaTiO ₃), zirconium dioxide (ZrO ₂), calcium carbonate (CaCO ₃), copper oxide (CuO), Fe ₂ O ₃ , manganese oxide (MnO ₂), silver nitrate (AgNO ₃), nickel oxide (NiO), tin oxide (SnO ₂), cerium oxide (CeO ₂), FeCl ₃ , magnesium oxide (MgO), titanium diboride (TiB ₂), cobalt ferrite (CoFe ₂ O ₄), molybdenum disulfide (MoS ₂), LiFePO ₄ , Co ₃ O ₄ , vanadium oxide (V ₂ O ₅), Li ₃ V ₂ , calcium chloride (CaCl ₂), molybdenum trioxide (MoO ₃), lithium chloride (LiCl), cadmium sulfide, nickel hydroxide, calcium hydroxide, calcium silicate, vanadium phosphate, Fe ₃ O ₄
金属材料	copper, silver, nickel, gold, aluminium, zirconium, platinum, palladium, chromium, aluminum
有機材料	polyethylene, epoxy, polystyrene, polyaniline (PANi), cellulose, polyester, polyvinyl alcohol (PVA), polyurethane, polypropylene, polypyrrole, chitosan, polymethylmethacrylate (PMMA), nylon, polycarbonate, polyamide, polyimide, hydrogel, collagen, polyelectrolyte, pyridine, glucose oxidase, polyacrylonitrile, polyvinylidene, polyvinyl chloride (PVC), polyvinylidene fluoride (PVDF), polysulfone, polyvinylpyrrolidone, polycaprolactone, polybutadiene, polylactic acid, polysaccharide, polydimethylsiloxane, chitin, polythiophene, cyclodextrin, polyacrylamide, polyolefin, vinylpyridine, carboxymethyl cellulose, polylactide, polyetherimide, polydopamine

表 4.3 出現論文数上位 20 材料単語の出現論文数

材料単語	出現論文数	材料単語	出現論文数
graphene	8736	Al ₂ O ₃	1965
epoxy	7980	polypropylene	1952
carbon nanotube	6386	polyethylene	1863
silica (SiO ₂)	5741	silver	1703
TiO ₂	4382	polyester	1643
aluminum	3500	ZnO	1637
cellulose	3359	alumina	1527
graphite	3269	nickel	1428
polyaniline (PANi)	2827	aluminium	1401
copper	2475	hydrogel	1396

4.3.3.材料単語の共起ネットワーク作成

4.3.1 で述べた分析対象の論文を出版年ごとに分け、それらに出現する 100 材料単語間の共起数を数えた。各出版年において論文に含まれる 100 材料単語同士で共起しているペア（以下「共起ペア」と称する）の数を論文数で割ることで、論文 1 本に含まれる共起ペア数の平均値を算出した。その結果、出版年 2009~2020 年の値はそれぞれ 1.27 組、1.30 組、1.32 組、1.46 組、1.45 組、1.59 組、1.52 組、1.49 組、1.40 組、1.50 組、1.72 組であった。これらの値の近似直線の式は $y = 0.0269x - 52.629$ (x : 論文出版年, y : 共起ペア数/論文出版数) と求められた。

x と y は正の相関を持っていたため、論文 1 本あたりに含まれる共起ペア数は増加傾向にあることが判明した(図 4.6)。なお、 y は 2009 年から 2020 年の間に 35.4%増加しており、材料の複合が年々加速していることが読み取れた。

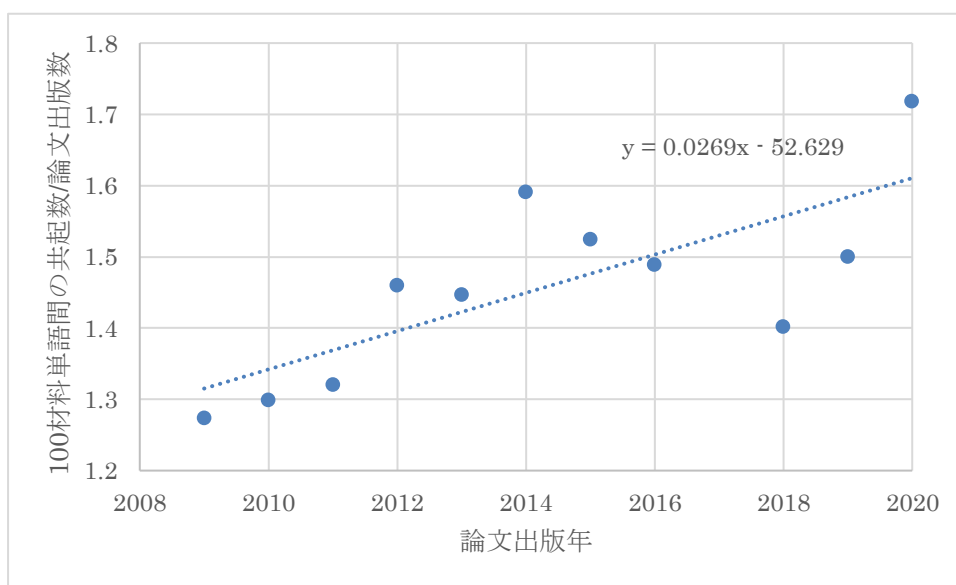


図 4.61 論文あたりの 100 材料単語間共起平均回数の時系列変化

各材料区分の材料単語との材料単語ペアのうち共起している割合を算出し(表 4.4)、材料区分毎の共起の傾向を比較した。

各材料区分の材料単語と 100 材料単語のペアのうち共起している割合は、カーボン材料が 56.3%、セラミックが 34.5%、金属材料が 56.8%、有機材料が 39.0%であった。カーボン材料と金属材料のこの値の高さはこれらの材料が多く材料単語と共起していることを表している。また、各材料区分の材料単語とカーボン材料のペアのうち共起している割合は、カーボン材料が 83.7%、セラミックが 50.2%、金属材料が 85.7%、有機材料が 50.7%であり、カーボン材料単語は全ての材料区分において半数以上の材料単語と共起していた。したがって、カーボン材料は多様な材料区分の材料と複合していることが推測できた。

金属材料については、100 材料単語とのペアが共起している割合(56.8%)に対してカーボン材料と高い割合(85.7%)で共起していた。それゆえ、金属材料はカーボン材料と複合の相性が良いことが示唆された。同様に、セラミックもカーボン材料単語間と高い割合(50.2%)で共起していたため、セラミックもカーボン材料との複合が盛んであると考えた。一方、有機材料はセラミックとカーボン材料の材料単語間で比較的高い割合(それぞれ 50.7%, 53.8%)で共起していた。したがって、有機材料はセラミックまたはカーボン材料と複合されることが多いことが読み取れた。

表 4.4 各材料区分の材料単語ペアのうち共起関係を持つ割合

材料区分	カーボン材料	セラミック	金属材料	有機材料	100 材料単語
カーボン材料	83.7%	50.2%	85.7%	50.7%	56.3%
セラミック	50.2%	33.6%	47.8%	29.6%	34.5%
金属材料	85.7%	47.8%	86.0%	53.8%	56.8%
有機材料	50.7%	29.6%	53.8%	42.9%	39.0%

次に、テスト期間における 100 材料単語間の共起の変化を分析するため、2012 年と 2015 年の時点で各 100 材料単語のうち共起している材料単語(以下「共起材料単語」と称する)の数を数えた。表 4.5 には出現論文数上位 10 材料単語の共起材料単語数を記載し、100 材料単語全ての共起材料単語数は付録の表 B.2 に記載した。共起材料単語数の最大値と最小値はそれぞれ、2012 年では silica の 73 個と calcium silicate の 0 個、2015 年では silica の 86 個と vanadium phosphate の 3 個であり、両年とも材料単語間で共起材料単語数には大きな幅があった。

100 材料単語の共起材料単語数の平均は 2012~2015 年の間に 21.0 個から 39.2 個に増加した。その際に、共起材料単語数が 80~99 個、60~79 個、40~59 個、20~39 個、20 個未満である材料単語数はそれぞれ 0→3 個、2→12 個、13→13 個、28→42 個、57→30 個に変化し、共起材料単語数が 60 個以上である材料単語は 11 個増加した。したがって、2012~2015 年の間に 100 材料単語間の共起が大きく増えていたことが読み取れた。

この結果をもとに、各 100 材料単語について 2012 年時点で未共起の材料単語のうち 2015 年までに共起した材料単語の割合(以下「共起率」と称する)を式(4.9)から算出した。

$$(\text{共起率}) = \frac{(\text{2015 年時点の共起材料単語数}) - (\text{2012 年時点の共起材料単語数})}{99 - (\text{2012 年時点の共起材料単語数})} \dots (4.9)$$

100 材料単語同士のペア 99 個×99 個=9801 組のうち 2012 年、2015 年時点で共起していたペアはそれぞれ 2598 組、3065 組であった。したがって、2012 年時点で未共起のペアのうち 9.0%が 2015 年までに共起していた。

各材料区分の材料単語の共起率の平均はそれぞれカーボン材料が 16.7%、セラミックが 8.0%、金属材料が 13.5%、有機材料が 8.1%であり、カーボン材料が高

い値を示した。さらに、各カーボン材料単語 CNT, graphene, graphite, diamond, fullerene, boron carbide の共起率はそれぞれ 26.1%, 66.1%, 25.7%, 7.4%, 6.9%, 9.5%であった。したがって、100 材料単語のうち、非常に高い共起率を示す graphene は 2012~2015 年の間に多数の材料単語と新しく共起していた。

100 材料単語のうち silica と CNT は 2012 年の時点で大半(70 個以上)の材料単語と共起しており、複合材料の構成材料としての汎用性の高さを示していた。しかし、これらも全ての材料単語と共起してはいなかった。そこで、2012 年時点で silica, CNT と未共起の材料単語について 2015 年時点での共起の有無を調査した(表 4.6)。その結果、2012 年時点で未共起である silica または CNT との材料単語ペア 48 組中 14 組(29.2%)が 2015 年までに共起したことが判明した。なお、silica, CNT の共起率はそれぞれ 32.0%, 26.1%であり、100 材料単語の共起率の平均値(9.0%)と比較していずれも非常に大きい値を示した。この結果から、すでに多くの材料単語と共起している材料単語は未共起の材料単語ともその後新しく共起する傾向が読み取れた。

表 4.5 出現論文数上位 10 材料単語の共起材料単語数

材料単語	共起材料単語数		共起率
	2012 年	2015 年	
graphene	43	80	66.1%
epoxy	62	72	27.0%
carbon nanotube	76	82	26.1%
silica (SiO ₂)	78	85	33.3%
TiO ₂	63	70	19.4%
aluminum	39	43	6.7%
cellulose	50	60	20.4%
graphite	64	73	25.7%
polyaniline (PANi)	54	65	24.4%
copper	52	67	31.9%

表 4.6 silica, CNT を含む材料単語ペアのテスト期間における共起生成の有無

テスト期間に共起したペア	テスト期間に共起しなかったペア
silica & carboxymethyl cellulose, silica & kaolinite, silica & MoS ₂ , silica & molybdenum disulfide, silica & polyetherimide, silica & polyolefin, silica & PVDF, silica & LiFePO ₄ , CNT & Li ₃ V ₂ , CNT & zirconium, CNT & Polydopamine, CNT & C ₃ N ₄ , CNT & CoFe ₂ O ₄ , CNT & CuO	silica & Li ₃ V ₂ , silica & polylactic acid, silica & polydopamine, silica & vanadium phosphate, silica & calcium silicate, silica & MoO ₃ , silica & molybdenum trioxide, silica & TiB ₂ , silica & titanium diboride, silica & polyvinylidene, silica & polysulfone, silica & nickel hydroxide, silica & V ₂ O ₅ , silica & vanadium oxide, silica & PVC, silica & Fullerene, CNT & polylactic acid, CNT & polylactide, CNT & melamine, CNT & carboxymethyl cellulose, CNT & vanadium phosphate, CNT & polyacrylamide, CNT & kaolinite, CNT & calcium silicate, CNT & calcium hydroxide, CNT & B ₄ C, CNT & CaCO ₃ , CNT & CaCl ₂ , CNT & LiCl, CNT & MoS ₂ , CNT & MoO ₃ , CNT & TiB ₂ , CNT & ZrO ₂

4.3.4. リンク予測

前節で既に多くの材料単語と共起している材料単語は、未共起の材料単語ともその後共起する傾向があることを述べた。したがって、このような材料単語については、未共起の材料単語に着目することでその後共起する材料単語の見当をつけることが可能である。しかし、100 材料単語の共起率の平均値は 9.0%であり、それ以外の材料単語についてはこの手法の適用が不可能である。そこで、リンク予測を用いて 100 材料単語と共起する材料単語の予測を試みた。

リンク予測の精度が高くなる条件を特定するために、8 種の指標(CN, JC, RA, AA, PA, CNSH, AISH, WIC)と 3 種のトレーニング期間(TRP1, TRP2, TRP3)計 24 パターンにおいてリンク予測を行った。なお、CNSH, RASH, WIC のスコアは材料区分をコミュニティ属性として算出した。24 パターンのリンク予測の結果(AUC と平均精度)を表 4.7 に示す。この時に作成した ROC 曲線は付録の図 B.1 に記載している。

初めに、指標ごとにリンク予測の結果を比較する。CN, JC, RA, AA, PA, CNSH, RASH, WIC を用いたリンク予測の AUC の平均値はそれぞれ 0.770, 0.707, 0.748, 0.739, 0.718, 0.773, 0.572, 0.550 であり、CN, CNSH を用いた場合に高い値を示した。また、CN, JC, RA, AA, PA, CNSH, RASH, WIC を用いたリンク予測の平均精度の平均値はそれぞれ 67.6%, 65.2%, 67.8%, 67.8%, 66.4%, 68.8%, 57.4%, 55.8%であり、CN, RA, AA, CNSH を用いた場合に高い値を示した。以上より、今回のリンク予測において適切な指標は、高い AUC と平均精度を示した CN と CNSH であると判断した。

次に、訓練期間ごとにリンク予測の結果を比較する。TRP1, TRP2, TRP3 を用いたリンク予測の AUC の平均値はそれぞれ 0.696, 0.699, 0.696 であり、大きな差は見られなかった。しかし、最も AUC が高くなる訓練期間はリンク予測に用いる指標によって異なり、CN を用いたリンク予測では TRP2 を、CNSH を用いたリンク予測では TRP1 を用いた場合に最も高い AUC を示した。一方、TRP1, TRP2, TRP3 を用いたリンク予測の平均精度の平均値はそれぞれ 63.9%, 65.1%, 64.8%であり、TRP2 または TRP3 を用いた場合に僅かに平均精度が高くなる傾向が見られた。しかし、CN の場合は TRP3 を、CNSH の場合は TRP1 を用いた場合に最も平均精度が高くなった。以上より、今回のリンク予測において適切な訓練期間は用いる指標によって異なっていた。

AUC と平均精度の比較の結果から、高い AUC と平均精度を有する指標と訓練期間の組み合わせである CN&TRP2 (AUC: 0.779, 平均精度: 68.5%)、CN&TRP3 (AUC: 0.777, 平均精度: 68.9%)、CNSH&TRP1 (AUC: 0.779, 平均精度: 69.7%)が提案手法のリンク予測において適切であると判断した。

表 4.7 各条件におけるリンク予測の結果

指標	訓練期間	AUC	カットオフ (陽性の条件)	平均精度
CN	TRP1	0.755	≥ 7	65.4%
	TRP2	0.779	≥ 9	68.5%
	TRP3	0.777	≥ 5	68.9%
JC	TRP1	0.705	≥ 0.091	62.7%
	TRP2	0.704	≥ 0.200	66.2%
	TRP3	0.713	≥ 0.186	66.6%
RA	TRP1	0.740	≥ 0.055	66.2%
	TRP2	0.749	≥ 0.130	68.1%
	TRP3	0.756	≥ 0.076	69.0%
AA	TRP1	0.733	≥ 1.048	66.0%
	TRP2	0.749	≥ 2.195	68.6%
	TRP3	0.734	≥ 1.207	68.9%
PA	TRP1	0.724	≥ 348	67.2%
	TRP2	0.740	≥ 500	68.9%
	TRP3	0.690	≥ 368	63.2%
CNSH	TRP1	0.779	≥ 8	69.7%
	TRP2	0.769	≥ 9	69.0%
	TRP3	0.770	≥ 8	67.7%
RASH	TRP1	0.575	≥ 0.064	57.5%
	TRP2	0.562	≥ 0.083	56.6%
	TRP3	0.580	≥ 0.020	58.1%
WIC	TRP1	0.558	≥ 0.014	56.2%
	TRP2	0.542	≥ 0.071	54.9%
	TRP3	0.549	≥ 0.111	56.3%

4.3.5. リンク予測の結果の精査

前節で適切と判断した指標と訓練期間の組み合わせ(CN&TRP2、CN&TRP3、CNSH&TRP1)の有用性を評価するため、これらを用いた場合のテスト期間のリンク予測精度を算出した。

初めに、CN、CNSH それぞれの各カットオフの真陽性・偽陽性・偽陰性・真陰性を数え、感度・特異度・平均精度を算出した(表 4.8; 表 4.9)。次に、CN&TRP2、CN&TRP3、CNSH&TRP1 から算出した各カットオフ(陽性の条件: $CN \geq 9$, $CN \geq 5$, $CNSH \geq 8$)でリンク予測を行った結果、平均精度はそれぞれ 64.7%, 64.1%, 56.9%であった。したがって、今回のリンク予測において CN&TRP2、CN&TRP3、CNSH&TRP1 のうち CN&TRP2 から算出したカットオフ(陽性の条件: $CN \geq 9$)が最も高いリンク予測精度を示した。

CN のカットオフのうち最大平均予測精度(64.8%)を示すカットオフは「陽性: $CN \geq 7$ 」であり、CN&TRP2 から算出したカットオフ(陽性の条件: $CN \geq 9$)の平均精度(64.7%)と僅差であった。したがって、トレーニング期間で高いリンク予測精度を示したカットオフは、テスト期間においても高いリンク予測精度を有することが判明した。

CN&TRP2 から算出したカットオフ(陽性の条件: $CN \geq 9$)を用いたテスト期間(2012~2015年)のリンク予測の結果、共起した 666 組の材料単語ペアのうち 364 組を共起、テスト期間中に共起しなかった材料単語ペア 6736 組のうち 5036 組を未共起と予測することに成功した。したがって、CN&TRP2 から算出したカットオフ(陽性の条件: $CN \geq 9$)を用いたリンク予測は、「陽性の条件: $CN \geq 7$ 」の場合と比較して、低確率で陽性を、高確率で陰性を予測することができた。

以上の結果より、CN&TRP2 を用いて高い予測精度を持つカットオフを求めることに成功した。よって、CN は材料単語の共起関係のリンク予測に有効であると判断できた。

表 4.8 各 CN 指標のカットオフのテスト期間における予測精度

カットオフ (陽性の条件)	真陽性	偽陽性	偽陰性	真陰性	感度	特異度	平均精度
≧1	658	6228	8	508	98.8%	7.5%	53.2%
≧2	648	5462	18	1274	97.3%	18.9%	58.1%
≧3	608	4798	58	1938	91.3%	28.8%	60.0%
≧4	568	4104	98	2632	85.3%	39.1%	62.2%
≧5	536	3522	130	3214	80.5%	47.7%	64.1%
≧6	480	2956	186	3780	72.1%	56.1%	64.1%
≧7	444	2496	222	4240	66.7%	62.9%	64.8%
≧8	402	2096	264	4640	60.4%	68.9%	64.6%
≧9	364	1700	302	5036	54.7%	74.8%	64.7%
≧10	316	1356	350	5380	47.4%	79.9%	63.7%
≧11	290	1128	376	5608	43.5%	83.3%	63.4%
≧12	250	900	416	5836	37.5%	86.6%	62.1%
≧13	216	696	450	6040	32.4%	89.7%	61.0%
≧14	184	552	482	6184	27.6%	91.8%	59.7%
≧15	158	436	508	6300	23.7%	93.5%	58.6%
≧16	132	332	534	6404	19.8%	95.1%	57.4%
≧17	114	248	552	6488	17.1%	96.3%	56.7%
≧18	98	192	568	6544	14.7%	97.1%	55.9%

表 4.9 各 CNSH 指標のカットオフのテスト期間における予測精度

カットオフ (陽性の条件)	真陽性	偽陽性	偽陰性	真陰性	感度	特異度	平均精度
≧1	649	6267	17	469	97.4%	93.0%	52.2%
≧2	624	5671	42	1065	93.7%	84.2%	54.8%
≧3	575	5058	91	1678	86.3%	75.1%	55.6%
≧4	536	4505	130	2231	80.5%	66.9%	56.8%
≧5	496	4061	170	2675	74.5%	60.3%	57.1%
≧6	454	3625	212	3111	68.2%	53.8%	57.2%
≧7	410	3194	256	3542	61.6%	47.4%	57.1%
≧8	369	2800	297	3936	55.4%	41.6%	56.9%
≧9	333	2475	333	4261	50.0%	36.7%	56.6%
≧10	305	2181	361	4555	45.8%	32.4%	56.7%

4.3.6. 国際比較

4.2.3 で述べた分析対象論文のうち出版数上位 10 カ国(中国・アメリカ・インド・フランス・ドイツ・イギリス・イタリア・日本・韓国・ロシア)の論文出版数を国毎に数えた。さらに、それらの論文のうち材料単語 **graphene**、**carbon nanotube(CNT)**、100 材料単語間の共起、2013~2015 年の間に初めて共起した 100 材料単語間の共起、それぞれを含む論文数とその割合を算出した(表 4.10)。論文出版数は中国とアメリカが群を抜いて多く(それぞれ 8504 本、7502 本)、その他 8 カ国の論文出版数はいずれも 3000 本以下であった。**graphene** を含む論文数の割合は 10 カ国の平均値が 4.4%である一方、中国は 10.1%、インドは 6.4%、韓国は 6.9%といずれも平均値より 2%以上高い値を示していた。**CNT** を含む論文の割合は 10 カ国の平均値が 5.1%であり、中国は 6.2%、韓国は 6.9%、ロシアは 8.2% といずれも平均値より 1.0%以上高い値を示していた。以上より、10 カ国のうち中国・インド・韓国・ロシアは **graphene**, **CNT** を含む論文を多く出版しており、カーボン材料の研究活動に重点を置いていると推測できた。

上記に加え、これら 4 カ国は 100 材料単語間の共起を含む論文の割合も高い。共起材料単語ペアを含む論文の割合は 10 カ国の平均値が 17.8%であるが、中国は 22.5%、インドは 23.8%、韓国は 22.4%、ロシアは 22.5%であり、4 カ国全て

が平均値よりも大幅に高い値を示していた。これは、カーボン材料の研究への特化が複合材料の開発における優位性につながったと考えられる。

今回分析対象の論文のうち、2013~2015年間に初めに共起した材料単語ペア（以下、「初共起材料単語ペア」と称する）を含む論文の平均被引用回数が31.9回である一方、それ以外の論文の平均被引用数は22.3回であった。したがって、初共起材料単語ペアを含む論文は高インパクトな論文である傾向を持つ。初共起材料単語ペアを含む論文の割合を算出した結果、10カ国の平均値0.57%に対して、中国は1.01%、インドは0.95%、韓国1.13%といずれも平均値より高い値を示していた。したがって、中国・インド・韓国は新規性が高く高インパクトな論文を多く産出していると推測できる。

以上の結果から、カーボンの材料単語を含んでいる論文と材料単語の共起を含んでいる論文の発行には相関性が見られた。この結果から、複合材料の研究活動の強化にはカーボン材料分野が重要であると判断できた。

表 4.10 論文出版数上位 10 カ国の論文出版数と特徴の比較

国	論文出版数	graphene を含む論文出版数(割合)	carbon nanotube (CNT)を含む論文出版数(割合)	共起材料単語ペアを含む論文出版数(割合)	初共起材料単語ペアを含む論文数(割合)
中国	8504	856(10.1%)	525(6.2%)	1911(22.5%)	86(1.01%)
アメリカ	7502	253(3.4%)	413(5.5%)	1189(15.8%)	39(0.52%)
インド	2948	190(6.4%)	139(4.7%)	703(23.8%)	28(0.95%)
フランス	2799	62(2.2%)	95(3.4%)	365(13.0%)	10(0.36%)
ドイツ	2357	71(3.0%)	74(3.1%)	362(15.4%)	8(0.34%)
イギリス	2271	47(2.1%)	73(3.2%)	245(10.8%)	5(0.22%)
イタリア	2084	55(2.6%)	97(4.7%)	252(12.1%)	7(0.34%)
日本	1854	45(2.4%)	95(5.1%)	362(19.5%)	6(0.38%)
韓国	1586	109(6.9%)	109(6.9%)	355(22.4%)	18(0.97%)
ロシア	1539	73(4.7%)	126(8.2%)	347(22.5%)	8(0.52%)

4.4. 考察

本節では、4.3 の結果に至った原因の分析と 4.3 の結果から提案手法の目的である複合可能な材料と材料の組み合わせの予測を達成できたかを議論する。また、4.3 の結果について複合材料の専門家である東京大学の古月文志特任教授へのインタビューを行った結果を基に提案手法の貢献性について論じる。

4.4.1. 材料単語の抽出

4.3 では、抽出した複合材料に関する論文に含まれる材料単語のうち、出現論文数上位 100 材料単語を抽出した。その結果、カーボン材料はその種類は少ないが多数の論文に出現していることが明らかになった。

材料単語の出現論文数は複合材料の構成材料としての汎用性に比例していると考えられる。例えば、100 材料単語のうち最も多くの論文に出現していた材料単語である **graphene** は、複合材料の構成材料として高い汎用性を持つ。グラフェンは強度、熱伝導、電気伝導、高表面積、柔軟性、透明性、など多数の優れた特性を有する。そのため、有機・セラミック・金属など様々な材料と組み合わせられた数多くの複合材料が開発されている。グラフェンを含む複合材料の用途は様々であり、電池電極材料、強化プラスチック、光触媒材料、細胞培養の基盤、などが例として挙げられる(Wu, 2012; Liu, 2013; Zhang, 2009; Ding, 2015)。

グラフェンと同様に出現論文数上位(3 位)かつカーボン材料である CNT も複合材料の構成材料として高い汎用性を持つ。CNT は機械的強度や電気的特性が高く、他の材料と複合することでその材料の強化や導電性の付与が可能である。それゆえ、グラフェンと同じく有機、セラミック、金属などあらゆる材料との複合材料が開発されている(Coleman, 2006; Hwang, 2001; Bakshi, 2013)。CNT を含む複合材料の用途は多様であり、強化プラスチック、電極材料、ウェアラブルデバイス、などがある(Coleman, 2006; Ashok, 2008; Jung, 2012)。さらに、CNT の大量生産法が確立されたことで、CNT を含む複合材料の開発は今後より加速することが見込まれている(NEDO, 2018)。

一方、出現論文数が 100 位である calcium hydroxide を含む複合材料の用途の大半は歯冠修復であり(Schuurs, 2000)、グラフェンや CNT の複合材料と比較するとその用途は非常に限定的である。以上より、材料単語の出現論文数は複合材料の構成材料としての汎用性に比例していると考えられる。

この結果について古月特任教授は「カーボン材料の魅力を表している」と評価している。上記でも述べた通り、グラフェンと CNT は複合材料の構成材料として反応性や強度が高く、実験における取り扱い易さに長けている。さらに、グラフェンや CNT はその独自の形状から、それらの材料でしか実現できない複合材料も数多く存在する。そのためグラフェンや CNT はその複合材料の開発が盛んであり、上記の結果はそのような背景を反映していると考えられる。

4.4.2. 材料単語の共起ネットワーク作成

4.3.2 では 2012 年時点と 2015 年時点における各 100 材料単語の共起材料単語の数を算出した。その結果、2012 年の共起材料単語数の範囲は 0~73 個、2015 年の共起材料単語数の範囲は 3~86 個であった。

各 100 材料単語の出現論文数と共起材料単語数の関係を分析した結果、この 2 つの要素の関係の近似式は $y=47.899e^{0.0544x}$ (x : 共起関係を持つ材料単語数, y : 材料単語を含む論文数) と算出された(図 4.7)。要するに、ある材料単語の共起材料単語数が増加するとき、その材料単語の出現論文数は指数関数的に増加する傾向を持つことが明らかになった。実際に共起材料単語数が 93 個である graphene の出現論文数は 8736 本である一方、共起材料単語数が 11 個である fullerene の出現論文数は 223 本であり、共起単語数の差は約 9 倍であるが論文数の差は約 40 倍であった。

同じカーボン材料間でこのような大きな差が生じる背景に、材料の取り扱い易さの違いが挙げられる。CNT やグラフェンは扱いが容易である一方、フラーレンは難溶性などといった特性から取り扱いが難しい(Jiang, 2012)。また、純粋なフラーレンの価格が非常に高い点も研究の壁として存在する。数年単位で成果を出すことが要される博士研究員などにとっては長期間論文が出ない可能性も高いため、取り扱いが難しいフラーレンは研究テーマとしては敬遠される傾向がある。しかし、古月特任教授は「フラーレンは物質としては非常に興味深いものであり、将来的に研究テーマとして取り組む価値がある」と述べている。

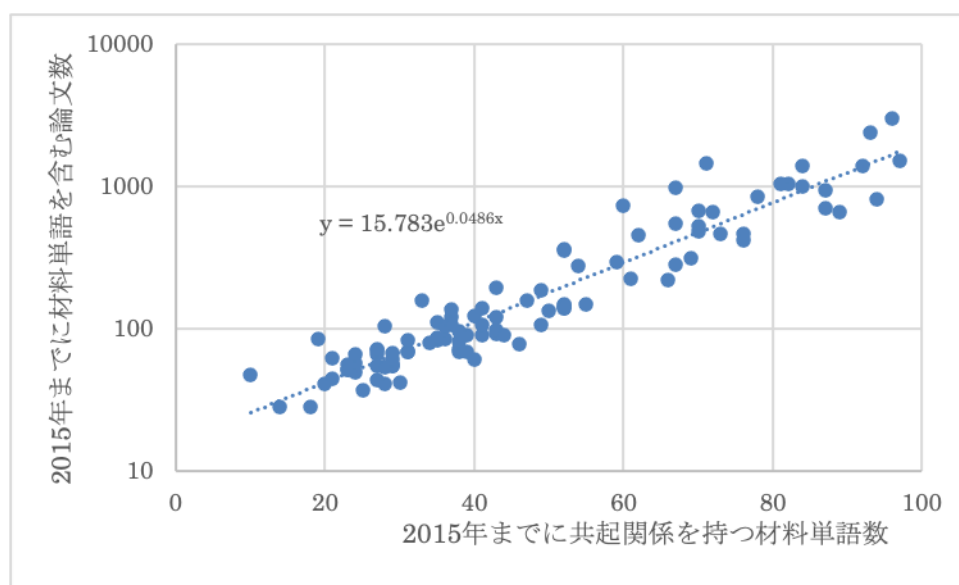


図 4.7 材料単語の出現論文数と共起材料単語数の関係

提案手法では「新しく共起した材料単語のペアは複合材料として報告されている」という仮定のもと材料単語共起ネットワークを作成した。本仮説を検証するために、silica あるいは CNT と 2012~2015 年の間に新しく共起した材料単語ペアが実際に複合材料として論文上で報告されているかを調査した。その結果、材料単語ペア 13 組中 11 組(silica & carboxymethyl cellulose, silica & polyetherimide, silica & polyolefin, silica & PVDF, silica & LiFePO₄, CNT & zirconium, CNT & polydopamine, CNT & C₃N₄, CNT & CoFe₂O₄, CNT & CuO, CNT & Li₃V₂)は 2012~2015 年の間に実際に複合材料として報告されていた (Somodi, 2015; Romero, 2011; Shakeri, 2015; Svitan'ko, 2014; Chu, 2014; Wang, 2015, Hu, 2015; Zhao, 2015; Abbas, 2013; Qiao, 2011)。残りの 2 組(silica & kaolinite, silica & MoS₂)はテスト期間に共起したが、その論文上では複合材料として記載されていなかった。silica & kaolinite が共起していた論文では、複合材料 mullite-SiC-Al₂O₃-ZrO₂ の合成に用いる材料として kaolinite が用いられていた (Seifollahzadeh, 2015)。silica & MoS₂ が共起していた論文では、複合材料 CoMo/L-KIT-6 の結晶構造が MoS₂ の結晶構造に類似していることが記載されていた (Duan, 2014)。

以上より、提案手法の仮説「共起材料単語ペアは複合材料の構成材料である」を実証することができた。

4.4.3. リンク予測

8種の指標(CN, JC, RA, AA, PA, CNSH, AISH, WIC)と3種のトレーニング期間(TRP1, TRP2, TRP3)の組み合わせ計24種のパターンにおいてリンク予測を行った結果、CN&TRP2 から算出したカットオフが最も高いリンク予測精度を示した。本節ではこの結果に至った原因を分析する。

まず初めに、CN と CNSH がトレーニング期間において高い AUC と平均精度を示した理由を推論する。材料単語共起ネットワークの性質が CN と CNSH の性質と一致したため、CN あるいは CNSH を用いた場合にリンク予測の精度が向上したと考えられる。以下にその根拠を述べる。

4.3.3 で述べたように、提案手法で作成した材料単語共起ネットワークでは新しい共起はすでに多くの材料単語と共起している材料単語との間で発生しやすい傾向が見られた。また、CN と CNSH は「共通隣人ノードを多く持つ2つのノードはその後リンクを持つ可能性が高い」と考える理論である。そのため、CN または CNSH を用いた材料単語共起ネットワークのリンク予測では、共起材料単語数が多い材料単語は未共起の材料単語との間で共通隣人ノードの数が多くなりやすいため、その材料単語間で共起が発生すると予測される確率が高い。したがって、今回作成した材料単語共起ネットワークでは共起材料単語が多い材料単語の周辺は新しく共起が発生しやすく、CN または CNSH を用いたリンク予測では共起材料単語が多い材料単語の周辺にリンクが発生すると予測される傾向があるため、高いリンク予測精度を示したと考えられる。

これに対して、RA, AA, RASH は共起材料単語が少ない材料単語に重みをつける理論である。RA, AA, RASH は「隣人ノードが少ないノードを共通隣人ノードとして持つ2つのノードはその後リンクを持つ可能性が高い」と考える理論である。したがって、RA, AA, RASH を用いた材料単語共起ネットワークのリンク予測では、共起材料単語数が少ない材料単語の共通隣人ノード間で共起が発生すると予測されやすい。しかし、今回作成した材料単語の共起ネットワークでは、共起材料単語が少ない材料単語の周辺では新しい共起が派生にくい傾向が見られた。その結果、これらの指標を用いたリンク予測精度は低い精度を示したと考えられる。

以上で述べた根拠から、CN, CNSH がトレーニング期間において高い予測精度を示したと考えた。しかし、CNSH はテスト期間では低い AUC と平均精度を示した。これは、材料単語のコミュニティ属性情報(提案手法では材料区分)を加

味したことでリンク予測精度が低下したことを表しており、CNSHはCNとは異なり、同じコミュニティに属するノードがリンクを形成すると精度が上がるスコア指標である点に起因していると推測できる。

テスト期間においてCNSHを用いたリンク予測が低い精度を示した背景には、テスト期間の間に異なる材料区分の材料単語間の共起が増加していたことが考えられる。実際に、4.3でgraphene, CNTがテスト期間の間に共起関係を持つ材料単語の推移を調べた結果、それぞれ43→93個、76→91個に急増していた。この結果は、テスト期間の間にgraphene, CNTが多数のカーボン材料以外の材料区分の材料単語と共起したことを表している。その結果、異なる材料区分間の共起が増加し、材料区分を加味したCNSHを用いたリンク予測の精度が低下したと考えられる。

次に、最適なトレーニング期間がスコア指標によって異なっていた理由を推論する。これは、上記でも述べたとおりトレーニング期間では同じ材料区分の材料単語間の共起が主流であったが、テスト期間では異なる材料区分の材料単語の共起が増加したためと考えられる。実際に、コミュニティ情報を加味する指標(CNSH, RASH, WIC)を用いるリンク予測では、古い情報(TRP1)を分析した場合に高い予測精度を示した。これに対してコミュニティ属性情報を加味しない指標(CN, JC, RA, AA, PA)を用いるリンク予測では、新しい情報(TRP3)を用いた場合に高い平均精度を示す傾向が見られた。

4.4.4. リンク予測の結果の精査

CN&TRP2から算出したカットオフ(陽性の条件： $CN \geq 9$)を用いてテスト期間の材料単語ネットワークのリンク予測を行った結果、共起した材料単語ペア666組のうち364組の共起、共起しなかった材料単語ペア6736組のうち5036組の未共起の予測に成功した。また、テスト期間において最大平均精度(64.8%)を示すカットオフ(陽性の条件： $CN \geq 7$)を用いた場合と比較して、低確率で陽性を、高確率で陰性を検出した。

上記の結果を基に本節ではCN&TRP2から算出したカットオフ(陽性の条件： $CN \geq 9$)を用いたリンク予測の精度を評価する。結論から述べると、カットオフ(陽性の条件： $CN \geq 9$)を用いたリンク予測は平均精度が最大値を示さなかったものの、陰性を高確率で検出したため有用な予測であると判断した。一般的に予測精度は平均精度を基に評価するが、予測の目的によっては平均精度以外の値を

重視する。例えば、がん検診の場合は陽性を見逃しは許されない一方、風邪の診察では診察のスピードが重要であり必要以上に陽性を検出しないことが求められる。したがって、後者の場合では陰性を確実に検出することが重要であるため、特異度が重視される。

提案手法のリンク予測の場合も特異度は重要であると考えた。なぜならば、研究活動には予算や時間に制限があるため、研究者は成果につながる可能性が低いテーマを回避する必要がある。したがって、今回 CN&TRP2 を用いたリンク予測は平均精度が最大値を示さなかったが、特異度も有用である点を考慮すると有用な結果と評価できる。この結果から提案手法の目的「複合可能な材料と材料の予測」を達成することに成功した。

次に、CN&TRP2 から算出したカットオフ(陽性の条件: $CN \geq 9$)を用いたリンク予測において共起を予測できなかった(テスト期間に共起したが未共起と予測された)材料単語ペアの特徴を分析した。そこで、各材料単語について材料単語ペアが偽陰性である割合(A)を式(4.10)より算出した。

$$A = \frac{BnC}{B} \dots (4.10)$$

A: 材料単語 x を含む材料単語ペアの偽陰性率

B: テスト期間に共起した材料単語ペアのうち x を含む材料単語ペア

C: 共起しないと予測された材料単語ペア

偽陰性率が 100%を示した(テスト期間で共起した材料単語全てを未共起と予測)材料単語は以下の 12 個であった: carboxymethyl cellulose, polydopamine, vanadium oxide(V_2O_5), polylactide, carbon nitride(C_3N_4), Li_3V_2 , molybdenum trioxide(MoO_3), cyclodextrin, melamine, calcium chloride($CaCl_2$), polyetherimide, lithium chloride($LiCl$)。これらは 2012 年時点で共起している材料単語が少ないという特徴を持つ。実際に、これらのうち cyclodextrin 以外は 2012 年時点で共起している材料単語が 10 個未満であった。これに対して多くの材料単語と共起している silica, CNT, graphene の偽陰性率はそれぞれ 28.6%, 50.0%, 40.5%といずれも半数以上の材料単語の共起が予測されていた。したがって、提案手法の共起の予測は共起している材料単語が少ない材料単語に関しては低い予測精度値を示した。

一方、偽陰性率が 0%である(テスト期間に共起した材料単語全てを共起と予測)材料単語は以下の 10 個であった: gold, polyvinyl alcohol(PVA), polyurethane, aluminium, polymethylmethacrylate(PMMA), barium titanate(BaTiO_3), nylon, polyimide, boron carbide(B_4C), titanium diboride(TiB_2)。これらの材料単語は偽陰性率 100%の材料単語と比較すると、2012 年時点で共起材料単語数が多い(いずれも 10 個以上)という共通点がある。

したがって、提案手法を用いた実験では、既に多くの材料と共起している材料単語(graphene、silica、CNT など)と共起する材料単語の予測精度は高いが、そうでない材料単語の予測精度は低くなる傾向が見られた。

4.4.5. 国際比較

4.3.1 で定義した論文の出版数上位 10 カ国(中国・アメリカ・インド・フランス・ドイツ・イギリス・イタリア・韓国・日本・ロシア)の出版論文の傾向を比較した。その結果、中国・インド・韓国・ロシアは graphene と CNT の両方またはいずれかの単語と 100 材料単語間の共起を含む論文の割合が多い傾向が見られた。この結果の背景には、中国・インド・韓国・ロシアがカーボン先進国である点が考えられる。以下、その根拠を述べる。

中国では第 13 次 5 年計画において、グラフェンを新材料開発計画の優先事項に指定している(Research and Markets, 2019)。実際に、15.7 億ドルの投資によるグラフェン産業パークの設立、企業・大学・研究機関が連携した研究共同組合 CGIA などグラフェンに特化した施設や組織が続々と設立されている。さらに、中国のグラフェンに関する特許出願数は世界最多であり(Zhao, 2018)、凄まじい勢いでグラフェンに関する技術が進歩している。

インドも中国と同様にグラフェンの産業に積極的に注力しており、2 億 5000 万ドル以上をナノテクノロジーの研究に投資している。その結果、2008~2013 年で 23 万本以上のナノサイエンスに関する論文が出版された(Soni, 2019)。

韓国では LG が CNT1200 トンの生産に向けた工場の増設、グラフェンの大量生産を行う企業の設立(Standard Graphene Inc., 2020)などカーボンに関する商業化に重点的に取り組んでいる。また、Graphene Hub Project(2012~2017)、Graphene Commercialization Technology Map(2012))などグラフェンに関する研究プロジェクトの推進が活発である。

ロシアでも CNT 産業の技術が進歩している。CNT の生産コストが非常に高価 (1kg あたり約数万ドル) であることは研究活動の障壁だったが、近年 OCSiA 社が 1kg あたり約数千ドルの CNT 生産法を開発した (Predtechensky, 2014)。CNT の生産・入手、を容易にした結果、CNT の研究を活性化することに成功した。以上より、これまで技術の中進国とされてきた中国・インド・韓国・ロシアではカーボン材料に関する技術が急速に進歩しており、その結果複合材料の開発においても優勢になったことが読み取れた。加えて、これらの国は 2012~2015 年の間に初めて共起した材料単語ペアを含む論文の割合も高い。このような論文はインパクトが高いことから、中国・インド・韓国・ロシアは斬新で高インパクトな研究成果を多く輩出していることが窺える。インパクトが高い研究成果の産出はこれらの国が研究のトレンドの先端に位置することを意味し、これまでの先進国の研究を模範とした研究成果の量産ではなく、跳躍的で他国に模範される研究成果を輩出していることが推測できる。

古月特任教授はこの結果について「現状をよく反映している」と評価している。中国・韓国等はカーボン材料が実用化される将来を見越して、これまでカーボン分野の開発に莫大な投資を行ってきた。今回分析した 2012~2015 年ごろはグラフェンの複合が活発になり始めた時期であり、中国・インド・韓国・ロシアの国際的な地位が上昇している最中の時期であると述べている。

グラフェン、CNT に勝る材料は今後数十年登場しないと予測されており、この 4 カ国以外も将来的にカーボンの開発に注力せざるを得ない可能性が高い。したがって、カーボン分野に先行投資している 4 カ国とその他の国の技術力の差は今後さらに拡大することが見込まれる。本結果は、日本の将来的なカーボン分野の研究力の衰退が窺え、この分野への投資と技術力の向上が今後の課題であることを反映している。

3.3 では、3 分野 (FET・EDLC・光触媒) において中国・韓国が未成熟・成長知識領域に関する論文を多く輩出していることを述べた。加えて、提案手法の結果から複合材料の分野でも中国・韓国は未成熟・成長知識領域 (カーボン材料) において優勢であることが判明した。それゆえ、中国・韓国は研究のトレンドの先端に位置しており、国際的な立ち位置の上昇が読み取れた。

4.5. 本章のまとめ

提案手法では複合可能な材料と材料の組み合わせの予測を目的としていた。そこで論文書誌情報を用いたリンク予測を行ったところ、先行研究よりも遥かに多い数千組の材料単語ペアから複合可能な材料の組み合わせを探索することに成功した(Yu, 2009; Hassan, 2009; Doreswamy, 2010)。提案手法では、複合材料に関する論文上で共起している材料単語ペアを複合材料の構成材料と仮定し、材料単語の共起を予測することで複合可能な材料単語の組み合わせを予測する手法を構築した。

提案手法の結果、テスト期間(2012~2015年)に共起する材料単語ペア 666 組のうち 364 組の材料単語ペアの共起、共起しない材料単語ペア 6736 組のうち 5036 組の未共起の予測に成功した。また、実際に共起した材料単語ペアを含む論文 13 本中 11 本が実際に複合材料として報告されていたため、材料単語の共起を複合材料の構成材料としてみなすことは有用であった。

斬新な材料の組み合わせの複合が重要視されている中で、提案手法はそのような複合の促進に役立つことが期待される。従来の MI 手法では、物性の数値化が難しい材料が一部存在するため、複合可能な材料同士の組み合わせを横断的に予測することが難しかった。提案手法では、より広い視野で新しい複合材料の候補を抽出することで、革新的な複合材料の開発の効率化に役立つことが期待できる。

5. 考察

本章では、政策形成や施策の運用、技術の商業化、研究計画の考案に対して本論文で提案した手法や枠組みがどのように貢献できるかを議論する。

5.1. 政策形成や施策の運用に対する貢献

本研究では、いくつかの手法で各国の研究活動方針を比較した。他国と比較して優勢または劣勢な知識領域を把握することで、強化の必要がある知識領域を特定することができた。

第 3 章では、各国の未成熟・成長知識領域の論文出版数の割合を比較した。その結果、中国・韓国は未成熟・成長知識領域の研究に集中していたが、日本は成熟知識領域にも継続的に注力していたことが明らかになった。また、知識領域・研究期機関の 2 つの軸で各国の研究力の配分方針を評価した結果、日本は一部の知識領域に研究力が偏っていることが判明した。

蓄積された多様な知識は知識の複合の基盤であり、新規知識の創出において不可欠である。そのため、長期的な新規知識の創出に向けて多様な知識領域に科学技術予算を分散的に投資することは重要である。したがって、提案手法を用いた実験では日本の新規知識の創出促進に向けた課題を抽出することに成功した。

第 4 章では、複合材料に関する論文を分析し、各国のカーボン材料単語 (graphene または CNT) と材料単語の共起を含む論文の割合を比較した。その結果、中国・インド・韓国・ロシアは両方の割合が高いことから、カーボン材料の開発強化が複合材料の開発強化にもつながったことが示唆された。したがって、提案手法を用いた実験では複合材料の研究の強化に向けて重要な知識領域(カーボン材料)を特定することに成功した。また、提案手法によって日本はカーボン材料に関する論文の割合が低く、今後のカーボン材料の研究強化が課題であることを明らかにした。

以上より、本論文で提案した手法は、各国の優勢または劣勢である分野を客観的に特定することで、今後の政策活動の意思決定を支援するものとなりうる。

5.2. 技術の商業化に対する貢献

第 3 章では、複合可能な材料と用途の組み合わせを予測し、特定の用途に対して用途開発の余地がある材料知識領域を予測した。この手法を用いた実験の結果、単体材料知識領域よりも複合材料知識領域の方が用途知識領域と強い関係を持つ傾向が見られ、複合材料には用途開発の余地があることが推察できた。また、提案手法で定義したマトリクスによって分類された未成熟・成長知識領域は特許の増加率が高い(商業化が急速に進んでいる)知識領域であった。したがって、提案手法を用いることで商業化の余地がある技術を特定することに成功した。新規技術を社会に還元する責任がある研究機関にとって、技術開発の上で商業化を見据えることが重要とされている。提案手法は技術の商業化における判断の支援として役立つことが期待される。

5.3. 研究計画の考案に対する貢献

第 4 章では、新規複合材料の開発に向けて複合可能な材料と材料の組み合わせを予測する手法を構築した。

予算や時間が限られている研究者は、インパクトが高く研究成果につながる可能性が高い研究計画を考案する必要がある。古月特任教授曰く、従来の複合材料の開発では材料の物性値をもとにした手動の理論計算の結果から複合可能な材料に見当をつけていた。しかし、手動的な手法では研究者個人の経験や関心が影響し易く、研究者に着目されていなかった斬新な発見には繋がり難い点が課題とされていた。これに対して提案手法は自動的に複合可能な材料の組み合わせの候補を抽出することが可能であり、研究者個人の経験や関心が影響しない斬新かつ具体的な研究テーマの選定指標としての活用が期待される。

6. 終章

本章ではこれまでの章の要点をまとめ、最後に本研究の今後の課題と展望を述べる。

近年、多様な新技術・製品の現場において、複合材料が注目されている。複合材料とは複数種の方法から構成される界面を持つ材料であり、個々の材料の特性を足し合わせることが可能である。例えば、炭素繊維強化プラスチック(CFRP)はプラスチックと炭素繊維で構成された複合材料であり、軽量性と高強度性を併せ持つ。そこで本研究では複合材料の重要性を踏まえ、複合材料の開発支援に向けて複合可能な知識・材料の組み合わせを予測する手法を構築した。本論文の提案手法を用いた実験では、複合材料に関する大規模な書誌情報のデータセットと提案手法を用いて、材料に関する既存知識の複合関係を分析し、複合によって新規知識を創出している知識・材料の組み合わせを明らかにした。

第 1 章では、本研究に至った背景と本研究の目的を述べた。材料分野では知識の急増に伴う知識の細分化が進む一方、知識の複合によって複合材料などの新規知識が創出されている。また、新規材料開発の効率化に向けて材料の物性データを活用した材料開発手法(MI)が近年登場した。しかし、材料の物性データはその材料自身に関する詳細な情報を含んでいるが、他の材料との関係情報は限定的である点に課題があることが知られている。新規知識は既存知識のネットワークの周辺に派生するため、新規材料の開発において材料に関する既存知識のネットワークを考慮することが有効であると考えられる。実際に、材料に関する既存知識のネットワークから新規熱伝導材料を予測することに成功している先行研究も存在する。

材料に関する既存知識のネットワークを基にした新規複合材料の予測についての先行研究は少ないが、本研究では、材料に関する既存知識のネットワークから複合材料に関する新規知識の予測が可能との着想の下、既存知識のネットワークの情報をもとに複合可能な知識・材料の組み合わせを検出する手法を構築し、新規複合材料の開発プロセスに貢献することを目指した。

第 2 章では、複合可能な知識・材料の組み合わせの予測に関する先行研究をレビューした。具体的には、複合可能な材料と用途の組み合わせの予測手法とその用途(既存材料の用途開発)、新複合可能な材料と材料の組み合わせの予測手法とその用途(新規複合材料の開発)の 2 点を挙げた。

第 3 章では、複合可能な材料と用途の組み合わせの予測を行うための手法を提案した。具体的には、複合可能な材料に関する知識領域(材料知識領域)と用途に関する知識領域(用途知識領域)の複合関係の分析から特定の用途に関して開発の余地がある材料を特定した。提案手法では、初めに、任意の分野の論文引用関係ネットワークをクラスタリングすることで知識領域を得た。次に、これらの知識領域を新たに提案したマトリクス上にマッピングし、それらの位置から成長率が高い「未成熟・成長知識領域」を特定した。

この手法を用いた実験の結果、未成熟・成長知識領域では特許出願が高い増加率を示す、商業化が急速に進んでいる知識領域であることが示唆された。また、各知識領域間のコサイン類似度を算出した結果、複合材料知識領域が特定の用途知識領域と高い類似度を示した。さらに、未成熟・成長知識領域に属する論文出版数の割合から、各国の未成熟・成長知識領域における優位性を評価した。日本は、未成熟・成長知識領域において成長の余地があり、新規技術の創出の促進に向けた多様な技術に対する分散的な投資という課題が浮かび上がった。

第 4 章では、複合可能な材料と材料の組み合わせの予測を行うための手法を提案した。複合可能な材料と材料の予測に関する先行研究では、物性値を用いたものが一般的であった。しかし、物性値の取得が難しい材料も存在するため、予測対象に含まれる材料は限定的であった。そこで提案手法では、論文書誌情報から多数の材料に関する情報を収集が可能との着想の下、複合可能な材料と材料の組み合わせを予測する手法を構築した。

既に複合が報告されている材料の組み合わせは、論文上での材料単語名の共起から特定することができる。そこで、複合可能な材料と材料の組み合わせの予測を、論文中で共起する材料単語の予測と捉えてモデルを構築している。具体的には、論文書誌情報を用いて材料単語の共起関係ネットワークを作成し、ネットワークのリンク予測によって複合可能な材料の組み合わせを予測する仕組みを構築した。

実験の結果、作成した材料単語の共起ネットワークではグラフェンとカーボンナノチューブが持つリンクが急増していることが明らかとなった。これはカーボン材料を含む複合材料の開発が急速に進んだことを意味しており、カーボン材料の人気を実証した。また、材料単語の共起ネットワークを用いたリンク予測では CN 指標を用いた場合に最も高い予測精度を示した。これらの結果から、材料単語は共起ネットワークにおいて近い距離にある材料単語(共通隣人ノード

を持つ材料単語)と複合する傾向があるとの知見が得られた。さらに、各国の出版論文の比較の結果、中国・韓国はカーボン材料分野において優勢であり、第3章と同様にこれらの国は未成熟・成長知識領域の研究開発に力を入れていることが示唆された。

第5章では、政策形成や施策の運用、技術の商業化、研究計画の考案に対する本論文で提案した手法や枠組みの貢献性を議論した。まず、政策形成に対しては、提案手法によって強化の必要がある分野を客観的に把握することで、政策形成における意思決定支援に役立つことが期待される。第3章の提案手法を用いた実験では、各国の研究機関に属する研究者が発表した論文のうち未成熟・成長知識領域に属する割合から各国の未成熟・成長知識領域における優位性を評価した。次に、技術の商業化に対しては、第3章で構築した手法を用いて商業化の余地がある知識領域を早期の段階で特定することが見込まれる。提案手法で定義したマトリクスによって特許の増加率が高い(商業化が急速に進んでいる)知識領域を特定した。最後に、研究企画に対しては、第4章で提案した複合可能な材料の予測手法が具体的な研究テーマの選定指標としての活用が期待される。提案手法では、複合材料に関する論文上の材料単語の共起ネットワークを分析し、複合可能である具体的な材料の組み合わせを予測した。

本論文の最後に、本研究の今後の課題と展望について述べる。まず、第3章で構築した手法では、提案手法を用いて特許書誌情報を分析し、今回の論文書誌情報の分析結果と比較することである。本研究では研究の知識領域の中で最も早く商業化が進んでいるものを特定することに成功した。しかし、このような知識領域が特許書誌情報上ではどのような立ち位置(成長率、規模など)かはまだ明らかになっていない。そのため、特許の書誌情報の分析結果から未成熟・成長知識領域の特徴について理解を深めることが今後の課題となる。第4章の予測では、予測精度の向上が課題である。本研究では、8種の指標を用いて材料単語間の共起の予測精度を比較した。今後は、複数の指標を用いた重回帰分析やリンクの重みを加味したリンク予測など多様な手法を検証し、提案手法の予測精度の改善を目指す。

本論文では、複合可能な知識・材料の組み合わせを予測する手法を提案し、実データを用いた検証によりその有効性を確認した。本研究の提案手法は、複合材料の技術開発競争が激化する環境下において、競争優位に向けた意思決定を支援するものとなりうる。

付録 A: 3.3 において省略したデータ

本論文の 3.2 の手法を用いて得られた結果のうち、3.3 の結果に掲載していないデータを記載する。

3.3.2 FET

表 A.1 各知識領域の特徴語

#1-1-1		#1-1-2		#1-1-3	
単語	TF-IDF	単語	TF-IDF	単語	TF-IDF
nanowires	0.0085	nanotube	0.0124	tfet	0.0074
nanowire	0.0064	carbon nanotube	0.011	tunneling	0.0043
zno	0.0040	carbon	0.0085	tfets	0.0042
growth	0.0019	cnt	0.0034	tunnel	0.0038
inas	0.0017	walled	0.0033	tunnel field	0.0033
transport	0.0015	swnts	0.0031	tunnel field effect transistor	0.0033
silicon nanowires	0.0013	walled carbon	0.0031	tunnel field effect	0.0033
quantum	0.0012	nanotube field	0.0031	subthreshold	0.0026
nanowire field	0.0012	walled carbon nanotube	0.0031	tunneling field	0.0026
nanowire field effect	0.0012	nanotube field effect	0.0031	tunneling field effect	0.0026

#1-2-1		#1-2-2		#1-2-3		#1-2-4	
単語	TF-IDF	単語	TF-IDF	単語	TF-IDF	単語	TF-IDF
membrane	0.0058	nanowire	0.0043	graphene	0.0076	sensor	0.00957
sensor	0.0052	noise	0.0042	nanotube	0.0074	sensing	0.00433
ion	0.0044	detection	0.0034	carbon nanotube	0.0067	organic	0.00432
biosensor	0.0036	nanowires	0.0029	carbon	0.0057	detection	0.00333
enzyme	0.0028	sensor	0.0027	detection	0.0042	electronics	0.00291
ion sensitive	0.0027	dna	0.0023	sensor	0.0042	film	0.00264

sensitive field effect transistor	0.0025	label free	0.0023	dna	0.004	organic field	0.00238
sensitive	0.0024	biosensors	0.0022	biosensors	0.003	film transistor	0.00221
sensitive field effect	0.0024	label	0.0021	biosensor	0.0025	thin film	0.00205
glucose	0.0023	biosensor	0.002	protein	0.0021	thin film transistor	0.00198
#1-3-1		#1-3-2		#1-3-3			
単語	TF-IDF	単語	TF-IDF	単語	TF-IDF		
graphene	0.0166	mos2	0.0238	black phosphorus	0.0151		
transistor	0.0096	monolayer	0.0051	phosphorene	0.0146		
effect	0.0086	graphene	0.0047	black	0.0135		
field	0.0083	wse2	0.0046	phosphorus	0.0124		
field effect	0.0066	monolayer mos2	0.0045	graphene	0.0052		
effect transistor	0.0061	layer mos2	0.0041	mos2	0.0043		
field effect transistor	0.006	dichalcogenides	0.004	layer black	0.0041		
layer	0.0055	transition metal	0.0039	layer black phosphorus	0.004		
mos2	0.0054	disulfide	0.0037	silicene	0.0034		
device	0.0053	metal dichalcogenides	0.0037	monolayer	0.0032		
#2-1-1		#2-1-2		#2-1-3			
単語	TF-IDF	単語	TF-IDF	単語	TF-IDF		
pentacene	0.0068	pentacene	0.0053	organic	0.0061		
organic	0.0055	organic	0.0052	pentacene	0.0046		
film transistor	0.0039	dielectric	0.0044	crystal	0.0037		
thin film transistor	0.0033	film transistor	0.0036	rubrene	0.0033		
thin film	0.0029	memory	0.0033	single crystal	0.0028		
film	0.0029	thin film transistor	0.0031	film transistor	0.0025		
contact	0.0027	polymer	0.0027	film	0.0022		
organic thin film	0.0027	film	0.0026	polymer	0.0022		
mobility	0.0027	thin film	0.0026	thin film transistor	0.0022		

organic thin film transistor	0.0026	organic thin film transistor	0.0025	thin film	0.0022
#2-2-1		#2-2-2		#2-2-3	
単語	TF-IDF	単語	TF-IDF	単語	TF-IDF
organic	0.0047	polymer	0.0105	oligothiophenes	0.0041
derivative	0.004	conjugated	0.0063	conjugated	0.0036
crystal	0.0028	copolymer	0.0054	oligomers	0.0035
organic semiconductor	0.0026	conjugated polymer	0.0045	thiophene	0.0034
film transistor	0.0026	solar	0.0044	organic	0.0031
thin film transistor	0.0025	solar cell	0.0044	derivative	0.003
mobility	0.0025	acceptor	0.0042	liquid	0.0026
thin film	0.0023	donor	0.0038	molecule	0.0025
molecular	0.0022	photovoltaic	0.0032	polymer	0.0023
thiophene	0.0022	cell	0.0031	compound	0.0022
#2-3-1		#2-3-2		#2-3-3	
単語	TF-IDF	単語	TF-IDF	単語	TF-IDF
p3ht	0.0117	polymer	0.0071	light emitting	0.0062
hexylthiophene	0.0079	conjugated	0.0051	emitting	0.0061
polymer	0.0073	conjugated polymer	0.0038	organic	0.0055
conjugated	0.0053	film	0.0031	light	0.0054
regioregular	0.0047	organic	0.0022	ambipolar	0.0043
conjugated polymer	0.0043	chain	0.0021	emission	0.0042
chain	0.0036	thin film	0.002	organic light	0.0034
molecular weight	0.0034	mobility	0.0019	crystal	0.0033
morphology	0.0033	nanofibers	0.0019	organic light emitting	0.0033
film	0.0032	hexylthiophene	0.0019	emitting transistor	0.0032
#3-1-1		#3-1-2		#3-1-3	
単語	TF-IDF	単語	TF-IDF	単語	TF-IDF
strained	0.0073	delta	0.0052	inas	0.0022
strain	0.005	delta doped	0.0048	hemts	0.0018

size	0.0047	doped	0.0036	gaas	0.0018
mobility	0.0032	modulation doped	0.0025	model	0.0018
stress	0.0021	quantum	0.0024	impact ionization	0.0015
sil	0.0018	gaas	0.0022	inas/alsb	0.0014
channel	0.0018	pseudomorphic	0.0021	ionization	0.0014
virtual substrate	0.0018	heterostructures	0.0019	quantum	0.0014
hole	0.0018	doped field effect transistor	0.0018	channel	0.0014
hole mobility	0.0017	mobility	0.0018	breakdown	0.0013
#3-2-1		#3-2-2		#3-2-3	
単語	TF-IDF	単語	TF-IDF	単語	TF-IDF
gan	0.0111	gan	0.0103	gan	0.0046
algan/gan	0.0075	algan/gan	0.0095	algan/gan	0.0037
algan	0.004	hemts	0.0043	dielectric	0.003
heterostructures	0.004	current collapse	0.0041	passivation	0.0028
dimensional electron	0.0029	algan	0.0037	interface	0.0026
electron gas	0.0027	collapse	0.0034	al2o3	0.0026
dimensional electron gas	0.0027	hfets	0.0031	oxide	0.0023
aln	0.0026	mobility transistor	0.003	gate dielectric	0.0019
polarization	0.0026	electron mobility transistor	0.0029	hemts	0.0018
heterostructure	0.0025	electron mobility	0.0025	atomic layer	0.0017
#3-3-1		#3-3-2		#3-3-3	
単語	TF-IDF	単語	TF-IDF	単語	TF-IDF
ferroelectric	0.0036	igzo	0.0094	zno	0.0069
srtio3	0.0033	tfts	0.0085	tfts	0.0067
electrolyte	0.0025	film transistor	0.0073	film transistor	0.0057
film	0.0024	thin film transistor	0.0068	thin film transistor	0.0052
electric double	0.0024	amorphous	0.0054	thin film	0.0045
electric double layer	0.0024	tft	0.0051	zinc	0.0043
double layer	0.0022	thin film	0.0047	film	0.0039

transition	0.0022	zinc oxide	0.0043	zinc oxide	0.0036
electric	0.0021	zinc	0.0043	solution processed	0.0036
thin film	0.0021	film	0.0036	thin	0.0032

表 A.2 各知識領域の特許数とその増加率と特許の検索に用いた検索語

区分	知識領域	検索語 ※検索時は下記の検索語に”AND ((field-effect OR "field effect") AND transisto*)”を加えて検索
成熟知識領域	#1-1-1	nanowire
	#1-2-1	membrane OR sensor OR ion
	#2-3-2	conjugated AND polymer
	#2-3-3	light AND emitting
	#3-1-1	(strained OR strain OR stress) AND (si OR silicon)
	#3-1-2	delta AND dop*
	#1-1-2	carbon AND nanotube
	#1-2-2	noise
	#2-1-1	pentacene
	#2-1-2	pentacene AND dielectric
	#2-1-3	"single crystal" OR single-crystal
	#1-2-3	graphene
	#2-2-3	oligothiophenes OR oligomers OR conjugated OR thiophene
	#3-2-2	gan OR algan/gan
	#3-2-3	
	#3-3-1	ferroelectric OR sratio3
	#1-1-3	
	#1-3-1	tft OR tunneling OR tfts OR tunnel
#2-2-2		
未成	#1-3-2	mos2 ANDNOT mos ANDNOT mos1
熟・成長知識領域	#1-3-3	black AND phosph*
	#2-3-1	p3ht OR hexylthiophene
	#3-3-3	zno OR (zinc AND oxide)

表 A.3 各国の HIP 出版数上位 5 研究機関

国	出版数	機関 (大学ランキング順位) 赤文字: 上位 100 研究機関
アメリカ	25	Northwestern University (25)
	19	National Institute of Standards and Technology
	18	Massachusetts Institute of Technology (5)
	14	Stanford University (3)
	11	Purdue University (113)
	9	University of California, Berkeley (13)
	8	University Minnesota (65)
	7	Carnegie Mellon University (22), IBM Corporation, Oregon State University (251-300), Polyera Corporation, University of California, Santa Barbara (39), The University of Texas at Austin (46)
	6	National Institute of Standards and Technology, Rensselaer Polytechnic Institute, Rice University (101), University of Washington (32), US Army
	5	Army Research Laboratory, Columbia University (15), Hewlett Packard Corporation, Lawrence Berkeley National Laboratory, Oak Ridge National Laboratory, Palo Alto Research Center, University of California, Los Angeles (16), University of Southern California (68), Yale University (12)
4	Argonne National Laboratory, Stanford Synchrotron Radiat Laboratory, University of Massachusetts (141), The University of Texas at Dallas (201-250), US Army Research Laboratory	
3	Boston University (64), Case Western Reserve University, Cornell University (18), Michigan State University (99), Pennsylvania State University (75), Rutgers State University (123), SLAC National Accelerator Laboratory, Stanford Synchrotron Radiat Lightsource, Temple University (351), University of Maryland (117), University of Tennessee (251-300), University of Wisconsin (50), Wayne State University (351-400)	
2	Bell Labs, Brookhaven National Laboratory, Eindhoven University of Technology, IBM Thomas J Watson Research Center, Los Alamos National Laboratory, Michigan Technological University, Moment Performance Material, North Carolina State University (251-300), Stanford Institute for Material and Energy Science, Texas Instruments Inc, University of Illinois (36), University of	

		f Nebraska (301-350), Vanderbilt University (87) , Washington University (32) , Xerox Corporation
	1	Arizona State University (189), Belmont University of Colorado School Mines, Fisk University, Florida State University (201-250), Harvard University (6) , Hewlett Packard Labs, HORIBA Science Inc, IBM TJ Watson Research Center, Iowa State University (201-250), Kavli Institute at Cornell for Nanoscale Science, National Renewable Energy Laboratory, Ohio State University (90) , Philips Research Labs, Sandia National Labs, Solarmer Energy Inc, Stanford Linear Accelerator Center, SUNY Albany, Towson University, University of Arizona (163), University of California, San Diego (39) , University of Central Florida, University of Colorado (127), University of Florida (120), University of Kansas, University of North Carolina (63) , University of Nevada, University of New South Wales, University Pkwy, Yale-NUS College
中 国	13	Ministry of Education
	11	Chinese Academy of Sciences
	7	Peking University (42)
	6	Tsinghua University (47)
	5	University of Science and Technology of China (201-250)
	4	Nanjing University (251-300)
	3	Chinese University of Hong Kong (138), Fudan University (201-250), Qingdao University, University of Hong Kong (44) , Zhejiang University (251-300)
	2	Collaborative Innovation Center of Advanced Microstructures, Collaborative Innovation Center of Chemical Science and Engineering Tianjin, Collaborative Innovation Center of Quantum Matter, Hong Kong Polytech University (201-250), Nankai University, Renmin University of China (501-600), Sun Yat-sen University (351-400), Tianjin University (501-600), University of Electro Science and Technology of China (601-800)
	1	Anhui University of Technology, Beihang University, Beijing Institute of Technology, Beijing Jiaotong University, Beijing Technology and Business University, Beijing University of Chemical Technology, Changsha University of Science and Technology, Fuzhou University, Harbin Institute of Technology (501-600), Hong Kong University of Science and Technology (59) , Hunan Normal University, Hunan University (601-800), Jiangsu Normal University, Jilin University (601-800), Lanzhou University, Nanjing Tech University, Nanjing University of Aeronaut and Astronaut, Nanjing University of Posts and Telecommunications, National University of Technology, Northeast Normal University, Shaanxi Normal University, Shanghai Jiao Tong University (301-350), S

		hanghai University (601-800), Shenzhen University, Sichuan Normal University, Soochow University (501-600), Tongji University (501-600), University of Science and Technology Beijing (601-800), Xiangtan University, Xidian University (601-800), Zhejiang Normal University, Zhengzhou University
韓 國	15	Pohang University of Science and Technology (116), Yonsei University (301-350)
	9	Korea Research Institute of Chemical Technology
	8	Sungkyunkwan University (153)
	5	Electronics and Telecommunications Research Institute, Samsung Advanced Institute of Technology
	4	Korea University (251-300), Kyung Hee University (401-500)
	3	Hanyang University (351-400), Korea Institute of Science and Technology, Samsung Electronics
	2	Chung Ang University (501-600), Dong Eui University, Gwangju Institute of Science and Technology (301-350), Kookmin University, Korea Advanced Institutes of Science and Technology (148), Korea Electronics Technology Institute, Pusan National University (501-600), Samsung SKKU Graphene Center SSGC, Ulsan National Institute of Science and Technology
1	Dankook University, DNF Co Ltd, Hanbat National University, Hongik University, Inha University (601-800), Inje University, Korea Advanced Institutes of Technology, Korea Basic Science Institute, Kyungsoo University, LG Display R&D Center, Myongji University, Pukyong National University, Research Institute of Industrial Science and Technology, Seoul National University (85) , Soongsil University, University of Incheon, University of Ulsan (401-500), World Class University, Yeungnam University (601-800)	
日 本	9	The University of Tokyo (43)
	6	National Institute for Materials Science
	4	RIKEN, Japan Science and Technology Agency
	3	Tohoku University (201-250), Waseda University (601-800)
	2	Panasonic Corporation
	1	Chiba University (601-800), Kyushu Institute of Technology (601-800), National Institute of Advanced Industrial Science and Technology, Rigaku Corporation, Tokyo Institute of Technology (201-250)

3.3.3EDLC

表 A.4 各知識領域の特徴語

#1-1-1		#1-1-2		#1-1-3	
単語	TF-IDF	単語	TF-IDF	単語	TF-IDF
carbon	0.00266	mno2	0.00654	polymer	0.00794
activated	0.00232	manganese	0.00387	polymer electrolyte	0.00714
activated carbon	0.00210	manganese oxide	0.00293	ionic	0.00621
nanotube	0.00187	film	0.00275	electrolyte	0.00507
double layer	0.00174	mn3o4	0.00237	liquid	0.00464
double	0.00174	composite	0.00215	gel	0.00451
carbon nanotube	0.00174	alpha	0.00197	ionic liquid	0.00451
layer capacitor	0.00148	dioxide	0.00197	ionic conductivity	0.00295
double layer capacitor	0.00148	manganese dioxide	0.00196	double layer capacitor	0.00238
electric	0.00144	deposition	0.00183	layer capacitor	0.00237
#1-2-1		#1-2-2		#1-2-3	
単語	TF-IDF	単語	TF-IDF	単語	TF-IDF
nitrogen	0.00296	activated	0.00178	nanofibers	0.00228
doped	0.00248	activated carbon	0.00169	carbon nanofibers	0.00176
nitrogen doped	0.00192	derived	0.00160	organic	0.00173
mesoporous	0.00157	lignin	0.00154	composite	0.00152
doped carbon	0.00156	density	0.00134	electrospinning	0.00149
mesoporous carbon	0.00134	capacitor	0.00108	template	0.00140
template	0.00117	energy density	0.00102	polymer	0.00139
capacitance	0.00114	capacitance	0.00090	mesoporous carbon	0.00124

activated	0.00091	layer capacitor	0.00090	layer	0.00096		
electrochemical performance	0.00088	double layer capacitor	0.00090	capacitance	0.00092		
#1-3-1		#1-3-2		#1-3-3			
単語	TF-IDF	単語	TF-IDF	単語	TF-IDF		
power	0.00463	carbon	0.00393	redox	0.00313		
system	0.00439	pore	0.00376	ionic	0.00312		
control	0.00422	ion	0.00266	liquid	0.00301		
hybrid	0.00355	size	0.00248	ionic liquid	0.00297		
converter	0.00343	carbide	0.00217	electrochemical	0.00226		
battery	0.00319	ionic liquid	0.00214	activated	0.00197		
vehicle	0.00313	molecular	0.00201	activated carbon	0.00188		
management	0.00305	cdc	0.00191	capacitor	0.00179		
storage system	0.00257	activated	0.00152	layer capacitor	0.00146		
energy	0.00250	activated carbon	0.00133	double layer capacitor	0.00146		
#2-1-1		#2-1-2		#2-1-3			
単語	TF-IDF	単語	TF-IDF	単語	TF-IDF		
nitrogen	0.00231	pani	0.00397	carbon nanotube	0.00212		
doped	0.00216	mno2	0.00319	cnts	0.00208		
porous	0.00185	polyaniline	0.00286	nanotube	0.00201		
doped graphene	0.00156	composite	0.00245	hybrid	0.00200		
density	0.00138	ppy	0.00159	cnt	0.00192		
aerogels	0.00132	capacitance	0.00155	paper	0.00143		
doping	0.00130	polymerization	0.00154	deposition	0.00135		
foam	0.00130	specific capacitance	0.00132	catalyst	0.00128		
hydrogel	0.00116	ternary	0.00130	flexible	0.00117		
capacitance	0.00116	polypyrrole	0.00129	mwents	0.00080		
#2-2-1		#2-2-2		#2-2-3		#2-2-4	

単語	TF-IDF	単語	TF-IDF	単語	TF-IDF	単語	TF-IDF
paper	0.00213	msc	0.00345	fiber	0.00683	fe2o3	0.00403
flexible	0.00200	micro	0.00330	yarn	0.00360	anode	0.00230
cellulose	0.00198	laser	0.00247	shaped	0.00272	asymmetri c	0.00226
stretchable	0.00178	micro supercapac itors	0.00233	wearable	0.00243	mno2	0.00211
electrolyte	0.00175	silicon	0.00194	wire	0.00240	oxide	0.00162
mno2	0.00148	chip	0.00190	textile	0.00210	shell	0.00154
composite	0.00139	nitride	0.00183	fiber shaped	0.00197	asymmetri c supercapac itors	0.00153
textile	0.00123	microsuper capacitors	0.00141	electronics	0.00160	composite	0.00153
fiber	0.00101	fabrication	0.00130	wearable electronics	0.00139	cathode	0.00147
wearable	0.00098	electroche mical	0.00084	flexible	0.00127	capacity	0.00145
#2-3-1		#2-3-2		#2-3-3			
単語	TF-IDF	単語	TF-IDF	単語	TF-IDF	単語	TF-IDF
pedot	0.00358	pani	0.00630	mos2	0.01304		
ppy	0.00306	polyaniline	0.00327	mos2 nanosheets	0.00280		
polypyrrole	0.00243	capacitance	0.00104	molybdenum	0.00336		
mno2	0.00226	tio2	0.00146	molybdenum disulfide	0.00251		
carbon nanotube	0.00164	specific capacitance	0.00100	ws2	0.00294		
nanotube	0.00164	pani film	0.00087	disulfide	0.00285		
conducting	0.00159	carbon	0.00132	mose2	0.00184		

		nanotube			
conducting polymer	0.00156	specific	0.00098	nanosheets	0.00507
charge	0.00110	polymerization	0.00168	hydrothermal	0.00249
capacitance	0.00103	charge	0.00093	dichalcogenides	0.00157
pedot	0.00358	pani	0.00630	mos2	0.01304
#3-1-1		#3-1-2		#3-1-3	
単語	TF-IDF	単語	TF-IDF	単語	TF-IDF
mno2	0.00534	nico2o4	0.00644	znco2o4	0.00411
tio2	0.00421	mesoporous	0.00162	mnco2o4	0.00347
core	0.00233	cobaltite	0.00158	cuco2o4	0.00273
shell	0.00230	nickel cobaltite	0.00151	cofe2o4	0.00196
core shell	0.00209	graphene	0.00139	spinel	0.00167
tio2 nanotube	0.00178	spinel	0.00136	znfe2o4	0.00160
hierarchical	0.00151	hierarchical	0.00131	microspheres	0.00144
tio2 nanotube array	0.00100	nicoo2	0.00115	asymmetric	0.00130
supercapacitor	0.00095	microspheres	0.00107	supercapacitor	0.00105
surface	0.00095	porous nico2o4	0.00089	nimn2o4	0.00090
#3-2-1		#3-2-2		#3-2-3	
単語	TF-IDF	単語	TF-IDF	単語	TF-IDF
nio	0.00607	v2o5	0.00419	ldh	0.00534
nickel oxide	0.00191	vanadium	0.00239	double hydroxide	0.00405
alpha	0.00155	nanoparticles	0.00194	layered	0.00401
hierarchical	0.00144	ceo2	0.00193	double	0.00386
nanoparticles	0.00114	vanadium oxide	0.00146	layered double	0.00384
array	0.00109	vo2	0.00142	layered double hydroxide	0.00367
asymmetric	0.00106	lithium	0.00127	cobalt	0.00327
metal	0.00103	capacity	0.00127	ldhs	0.00271
based	0.00096	ion battery	0.00126	cobalt	0.00224

				hydroxide	
nanostructures	0.00095	energy	0.00088	nial	0.00143
#3-3-1		#3-3-2		#3-3-3	
単語	TF-IDF	単語	TF-IDF	単語	TF-IDF
organic	0.00244	ni3s2	0.00301	nico2s4	0.00730
organic framework	0.00231	sulfide	0.00232	coni2s4	0.00205
metal organic	0.00229	co9s8	0.00147	cuco2s4	0.00187
metal organic framework	0.00224	foam	0.00127	foam	0.00181
mofs	0.00167	synthesis	0.00123	nico2s4 nanotube	0.00155
phosphate	0.00122	cobalt	0.00122	cobalt	0.00140

表 A.5 各知識領域の特許の検索に用いた検索語

区分	知識領域	検索語
		※検索時は下記の検索語に”AND (supercapacit* OR (double layer capacit*))”を加えて検索
成熟 知識 領域	#1-1-1	"activated carbon" ANDNOT lignin
	#1-1-2	(mno2 OR "manganese oxide" OR mn3o4) AND (carbon OR cnt OR cnts OR nanotube*)
	#1-1-3	("polymer electrolyte" OR "ionic liquid") AND composite
	#1-2-1	nitrogen AND doped AND mesoporous AND carbon
	#1-2-2	(mno2 OR manganese oxide OR mn3o4) AND ((lignin OR derived) AND activated AND carbon)
	#1-2-3	"carbon nanofiber*" AND electrospinning
	#1-3-1	power AND control AND system
	#1-3-2	size AND pore AND carbon
	#1-3-3	"ionic liquid" AND (redox OR based)
	#2-1-1	nitrogen AND doped AND graphene
	#2-1-2	(pani OR polyaniline) AND graphene
	#2-1-3	graphene AND (cnt OR cnts OR mwent OR mwents)
	#2-2-1	(flexible OR stretchable) AND (carbon OR cellulose)
	#2-2-2	(msc OR "micro supercapacito*")

	#2-3-1	pedot OR ((polypyrrole OR ppy) AND conducting)
	#2-3-2	(pani OR polyaniline) AND (swcnt OR cnt OR cnts OR “carbon nanotub**”)
	#3-1-1	(mno2 AND nano*) OR (tio2 AND nanotube)
	#3-1-2	nico2o4
	#3-2-1	(nickel AND (hydroxide OR oxide)) OR nio
	#3-2-2	v2o5 OR vo2 OR vanadium
	#3-2-3	layered AND double AND hydroxid*
	#3-3-2	ni3s2 OR cos2 OR co9s8 OR nis2 OR ((nickel OR cobalt) AND (sulfide OR disulfide OR subsulfide))
未成熟・成長知識領域	#2-2-3	(fiber OR yarn OR textile) AND wearable
	#2-2-4	asymmetri*
	#2-3-3	mos2 OR “molybdenum disulfide” OR ws2
	#3-1-3	mnco2o4 OR znco2o4 OR cuco2o4 OR znfe2o4 OR cofe2o4
	#3-3-1	“metal organic framework” OR mof
	#3-3-3	nico2s4

表 A.6 各国の HIP 出版数上位 5 研究機関

国	出版数	機関 (大学ランキング順位) 赤文字: 上位 100 研究機関
アメリカ	18	Georgia Institute of Technology (33)
	6	University of California, Los Angeles (15), University of Central Florida
	5	Rice University (86), University of California, Santa Cruz (162)
	4	Drexel University (351-400)
	3	Case Western Reserve University (158), Massachusetts Institute of Technology (5), University of Delaware (201-251), The University of Texas at Dallas (201-250)
	2	Argonne National Laboratory, Duke University (17), Stanford University (3), University of Arkansas (501-600), University of California, Berkeley (18), University of Washington (25), University of Wisconsin (43)
1	Carnegie Mellon University (24), Cornell University (19), Florida A&M University, Florida State University (201-250), Harvard University (6), Kavli Energy NanoScience Institute, Kavli Institute at Cornell for Nanoscale Science, Kent State University (501-600), Michigan Technological	

		University, North Carolina State University (251-300), Northeastern University (193), Northwestern University (20), Pennsylvania State University (77), Purdue University (60), Rutgers State University (172), Southern Illinois University, Temple University (351-400), University of Akron, University of California, Santa Barbara (53), University of Maryland (69), University of North Texas, University of Nebraska (301-350), University of Notre Dame (150), University of Oregon (251-300), University of Penn (10), University of Tennessee (301-350), The University of Texas at Austin (49), United States Navy
中 国	68	Ministry of Education
	54	Chinese Academy of Sciences
	36	Huazhong University of Science and Technology (401-500)
	35	Zhejiang University (177)
	30	Fudan University (116)
	24	Sun Yat Sen University (351-400)
	18	Tsinghua University (30)
	13	Wuhan University of Technology
	12	Chongqing University (801-1000), National Center for Nanoscience and Technology, Xinyang Normal University
	11	Nanjing University Aeronaut and Astronaut, Yangzhou University
	10	Central South University, Nanjing University (169), Nanjing Tech University, Nankai University, University of Science and Technology of China, City University of Hong Kong
	9	Donghua University
	8	Anyang Normal University, Harbin Engineering University, Hunan University (601-800), Jilin University (601-800), Zhejiang Science Tech University
	7	Beijing Institute of Technology (601-800), Central China Normal University, Hong Kong University of Science and Technology, Jiangsu University, Jinan University, Soochow University (501-600)
	6	Collaborative Innovation Center Chem Science and Engineering, Lanzhou University, Nanjing University of Science and Technology, Shanghai Jiao Tong University (188), Tianjin University (501-600), Tongji University (401-500), Zhengzhou University
5	China Jiliang University, Harbin Institute of Technology (501-600), Hong Kong Polytech University, Peking University (27), University of Science and Technology Beijing (601-800), Zhejiang University of Technology	
4	Dalian University of Technology (601-800), Lanzhou University of Technology, Nanjing University	

	<p>of Posts and Telecommunications, South China University of Technology, Shaanxi Normal University, Suzhou Institute of Nanotech and Nanobion, University of Macau, Xi'an Jiaotong University (501-600)</p>
3	<p>Beihang University, China West Normal University, Fuzhou University, Guangzhou University, Hefei University of Technology, Huaqiao University, Jiangsu Normal University, Shanghai Ocean University, Shandong University, Yanshan University</p>
2	<p>Beijing University of Aeronaut and Astronaut, Beijing University Chemical Technology, China University of Mining and Technology, East China University of Science and Technology (601-800), Harbin Normal University, Harbin University of Science and Technology, Hebei University of Technology, Inner Mongolia University, Luoyang Normal University, Nanjing Normal University, Northwest University Xian, Shanghai University (601-800), Shanghai University of Engineering Science, Sichuan University (601-800), South Central University for Nationalities, South China University of Technology (501-600), Tianjin Normal University, University of Electronic Science and Technology of China (201-250), University of Jinan, Xiamen University, Zhengzhou University Light Industry</p>
1	<p>Aerospace Research Institute of Materials and Processing Technology, Anhui Provincial Key Laboratory of Controllable Chemical Reaction Material Chemical Engineering, Baoji University of Arts and Science, Beijing Composite Material Co Ltd, Changshu Institute of Technology, Changzhou University, China Academy of Engineering Physics, China Three Gorges University, China University of Petroleum (801-1000), Chinese People's Liberation Army General Hospital, Dongguan McNair Technology Co Ltd, Dongguan University of Technology, Guangdong University of Technology, Guangzhou Research Institute of Non-ferrous Metals, Hainan Entry Exit Inspection and Quarantine Bureau, Hang Zhou City Qual and Tech Supervisor and Testing Institute, Hebei University of Engineering, Hebei University of Science and Technology, Huaibei Normal University, Huazhong Agricultural University, Hubei University (601-800), Hunan University Arts and Science, Hunan University of Technology, Jiangsu University of Science and Technology, Jilin Medical University, Jilin Normal University, Jining University, Nanchang University, National Engineering Lab Text Fiber Material and Proc Technology Zheji, Northeast Normal University, Ningbo University, Ningxia University, North China Elect Power University, Northeast Normal University, Northwest Normal University, Northwestern Polytech University, Nanjing University of Posts and Telecommunications, Ocean University of China (801-1000), Qilu University of Technology, Qingdao Agricultural University, Qingdao University of Science and Technology, Qufu Normal University,</p>

		Radiat and Hazardous Wastes Supervisor Center Shiyan, South China Normal University, Shandong Normal University, Shandong University of Science and Technology, Shanghai Institute of Technology, Shanghai Normal University, Shaoxing University, Shihezi University, State Key Lab Electro Thin Films and Integrated Device, Tianjin Institute Power Sources, Tianjin Polytech University, Tianjin University of Technology, University of Town, Wuhan University (401-500), Xiamen Entry Exit Inspection and Quarantine Bereau Peo, Xiamen Entry Exit Inspection and Quarantine Bur People, Xian University of Science and Technology, Xinyang University, Zhanjiang Juxin New Energy Co Ltd, Zhanjiang Normal University, Zhejiang Ocean University, Zhongyuan University of Technology
韩 国	9	Hanyang University (351-400)
	6	Jeju National University, Seoul National University (74)
	5	Pusan National University (601-800)
	4	Korea Institute of Science and Technology
	3	Advanced Institutes of Convergence Technology, Dongguk University, Inha University (601-800), Institute for Basic Science Korea, Korea Advanced Institutes of Science and Technology (95) , Sungkyunkwan University (111), Ulsan National Institute of Science and Technology (201-250), Yeungnam University (601-800)
	2	Chosun University, Chung Ang University (401-500), Kangwon National University, Korean Institute Material Science, Korea Basic Science Institute, Kyung Hee University (401-500), Myongji University, Samsung Elect, Yonsei University (201-250)
	1	Chungnam National University (801-1000), DGIST, Hanbat National University, Konkuk University (501-600), Korea Electrotechnology Research Institute, Korean Institute of Science and Technology, National Nanofabrication Center, University of Ulsan (501-600)
日 本	6	National Institute for Materials Science
	2	Tohoku University (201-250)
	1	Kyushu Institute of Technology (801-1000), Shizuoka University (801-1000), Tokai University (801-1000), University of Tsukuba (401-500), Waseda University (601-800)

3.3.4 光触媒

表 A.7 各知識領域の特徴語

#1-1-1		#1-1-2		#1-1-3	
単語	TF-IDF	単語	TF-IDF	単語	TF-IDF
dye	0.00471	reactor	0.00253	membrane	0.00498
zno	0.00310	acid	0.00217	disinfection	0.00314
decolorization	0.00217	reduction	0.00199	inactivation	0.00304
catalyst	0.00212	reaction	0.00185	coli	0.00280
blue	0.00201	tio2	0.00184	treatment	0.00212
orange	0.00195	film	0.00181	solar	0.00186
composite	0.00194	phenol	0.00178	bacteria	0.00181
azo	0.00186	electrode	0.00172	tio2	0.00177
adsorption	0.00186	rate	0.00168	ozonation	0.00173
azo dye	0.00174	oxidation	0.00163	process	0.00166
#1-2-1		#1-2-2		#1-2-3	
単語	TF-IDF	単語	TF-IDF	単語	TF-IDF
nanotube	0.00313	doped	0.00372	doped	0.00244
tio2 nanotube	0.00187	nitrogen	0.00358	surface	0.00183
mesoporous	0.00174	visible	0.00284	oxygen	0.00182
array	0.00171	visible light	0.00279	doped tio2	0.00176
titania	0.00171	doped tio2	0.00270	doping	0.00171
phase	0.00163	light	0.00243	ion	0.00166
rutile	0.00153	doping	0.00237	rutile	0.00154
nanoparticles	0.00152	carbon	0.00233	catalyst	0.00153
particle	0.00149	codoped	0.00196	band	0.00146
anatase	0.00148	band	0.00191	adsorption	0.00146
#1-3-1		#1-3-2		#1-3-3	
単語	TF-IDF	単語	TF-IDF	単語	TF-IDF
sio2	0.00304	toluene	0.00376	film	0.00544
silica	0.00295	air	0.00325	coating	0.00320
composite	0.00290	oxidation	0.00311	thin	0.00283
coating	0.00244	reactor	0.00304	thin film	0.00278

titania	0.00196	gas	0.00278	fabric	0.00266
carbon	0.00195	catalyst	0.00260	tio2 film	0.00259
mesoporous	0.00187	photocatalytic oxidation	0.00236	anatase	0.00228
cleaning	0.00183	compound	0.00229	deposition	0.00223
nox	0.00172	gas phase	0.00220	sputtering	0.00212
carbon nanotube	0.00164	formaldehyde	0.00203	substrate	0.00207
#2-1-1		#2-1-2		#2-1-3	
単語	TF-IDF	単語	TF-IDF	単語	TF-IDF
plasmonic	0.00269	bivo4	0.00667	biocl	0.00432
ag3po4	0.00345	bi2wo6	0.00471	bi2o3	0.00381
plasmon	0.00213	bismuth	0.00171	bismuth	0.00202
silver	0.00201	phase	0.00122	biobr	0.00356
gold	0.00181	bi2moo6	0.00245	bioi	0.00300
agbr	0.00180	composite	0.00154	nanosheets	0.00195
resonance	0.00148	photoelectroche mical	0.00119	bifeo3	0.00230
composite	0.00176	hydrothermal	0.00157	phase	0.00107
agcl	0.00205	solution	0.00107	composite	0.00166
metal	0.00172	energy	0.00092	facet	0.00149
#2-2-1		#2-2-2		#2-2-3	
単語	TF-IDF	単語	TF-IDF	単語	TF-IDF
srtio3	0.00332	graphene	0.00620	complex	0.00430
splitting	0.00263	rgo	0.00365	oxidation	0.00300
water splitting	0.00259	tio2	0.00345	catalyst	0.00270
band	0.00248	composite	0.00322	ligand	0.00228
natao3	0.00206	graphene oxide	0.00315	alcohol	0.00216
layered	0.00202	zno	0.00266	transfer	0.00210
perovskite	0.00190	carbon	0.00251	system	0.00208
water	0.00184	nanocomposites	0.00233	molecular	0.00206
solid	0.00168	oxide	0.00227	pom	0.00186

hydrogen	0.00166	dot	0.00227	electron transfer	0.00173
#2-3-1		#2-3-2		#2-3-3	
単語	TF-IDF	単語	TF-IDF	単語	TF-IDF
c3n4	0.00812	mos2	0.00444	co2	0.00661
carbon nitride	0.00271	evolution	0.00197	reduction	0.00366
nitride	0.00270	production	0.00188	tio2	0.00303
graphitic	0.00227	tio2	0.00181	co2 reduction	0.00273
composite	0.00225	splitting	0.00163	framework	0.00246
graphitic carbon	0.00217	water splitting	0.00158	dioxide	0.00241
graphitic carbon nitride	0.00215	hydrogen	0.00154	carbon dioxide	0.00236
degradation	0.00209	hydrogen evolution	0.00145	complex	0.00236
nanosheets	0.00174	generation	0.00143	metal organic	0.00224
heterojunction	0.00157	photocatalytic hydrogen	0.00141	mil	0.00220
#3-1-1		#3-1-2		#3-1-3	
単語	TF-IDF	単語	TF-IDF	単語	TF-IDF
hierarchical	0.00170	ag-zno	0.00220	sno2	0.00649
flower	0.00168	visible light	0.00159	fe2o3	0.00269
porous	0.00146	halloysite	0.00091	wo3	0.00187
hollow	0.00115	doped	0.00376	alpha fe2o3	0.00142
growth	0.00179	performance	0.00108	nanofibers	0.00152
zno nanostructures	0.00141	shell	0.00126	alpha	0.00173
nanostructures	0.00171	zno/ag	0.00108	ceo2	0.00198
nanosheets	0.00138	doping	0.00217	doped sno2	0.00122
microspheres	0.00117	enhanced	0.00129	sno2 nanoparticles	0.00129
array	0.00142	light	0.00153	cuo	0.00175

#3-2-1		#3-2-2		#3-2-3	
単語	TF-IDF	単語	TF-IDF	単語	TF-IDF
fe2o3	0.00535	tio2	0.00559	cu2o	0.01153
alpha	0.00463	facet	0.00437	cuo	0.00698
hollow	0.00405	anatase	0.00339	copper	0.00278
alpha fe2o3	0.00392	black	0.00266	cuprous	0.00266
hematite	0.00236	anatase tio2	0.00261	cuprous oxide	0.00260
sphere	0.00223	ti3+	0.00254	film	0.00234
zn2sno4	0.00189	vacancy	0.00225	octahedron	0.00211
in2o3	0.00176	oxygen vacancy	0.00208	morphology	0.00179
nanostructures	0.00154	exposed	0.00196	microcrystals	0.00164
zn2a2o4	0.00108	black tio2	0.00169	degradation	0.00160
#3-3-1		#3-3-2		#3-3-3	
単語	TF-IDF	単語	TF-IDF	単語	TF-IDF
radical	0.00302	oxide	0.00450	radical	0.00280
acid	0.00240	zeolite	0.00390	trifluoromethyl ation	0.00272
transfer	0.00234	tio2	0.00374	photoredox	0.00252
bond	0.00228	surface	0.00346	synthesis	0.00243
coupling	0.00227	silica	0.00344	bond	0.00231
electron transfer	0.00204	site	0.00279	alkene	0.00230
state	0.00192	ion	0.00275	aryl	0.00222
cross	0.00184	titanium	0.00269	photoredox catalysis	0.00217
aryl	0.00180	reduction	0.00268	cyclization	0.00216
photoredox	0.00177	semiconductor	0.00249	salt	0.00214

表 A.8 各知識領域の特許数とその増加率と特許の検索に用いた検索語

区分	知識領域	検索語 ※検索時は下記の検索語に”AND photocatal*”を加えて検索
成熟知識領域	#1-1-1	decolorization
	#1-1-2	reactor
	#1-1-3	inactivation OR disinfection
	#1-2-1	(tio2 OR titania titanate) AND nanotube
	#1-2-2	nitrogen AND doped AND tio2
	#1-2-3	rutile OR ceo2
	#1-3-1	(sio2 OR silica) AND (tio2 OR titania)
	#1-3-2	toluene AND air
	#1-3-3	film AND coating
	#2-1-1	ag3po4
	#2-1-2	bivo4 OR bi2wo6
	#2-2-1	srtio3 OR ta3n5 OR natao3
	#2-2-2	graphene AND composite
	#2-2-3	complex AND ligand
	#2-3-1	(carbon AND nitride AND grap*) OR c3n4
	#2-3-2	mos2
	#2-3-3	co2 OR “carbon dioxide”
	#3-1-1	hierarchical
	#3-1-2	ag AND zno
	#3-2-1	fe2o3 OR zn2sno4
	#3-2-2	tio2 AND (facet OR phase)
	#3-2-2	anatase
	#3-3-2	zeolite
	#3-3-3	trifluoromethylation
未成熟・成長知識領域	#2-1-3	biocl
		biobr
		bioi
	#3-1-3	zno-sno2
	#3-2-3	cuo OR cu2o OR “cuprous oxide”

#3-3-1	radical AND coupling
--------	----------------------

表 A.9 各国の HIP 出版数上位 5 研究機関

国	出版数	機関 (大学ランキング順位) 赤文字: 上位 100 研究機関
アメリカ	14	Princeton University (7)
	12	Massachusetts Institute of Technology (5)
	6	University of Wisconsin (43)
	5	University of Colorado (100), University of Illinois (37)
	4	Los Alamos National Laboratory, North Dakota State University, University of North Carolina (56), University of Penn (10)
	3	Carnegie Mellon University (24), University of California, Santa Barbara (53)
	2	CALTECH (3), Colorado State University (351-400), Indiana University (117), Johns Hopkins University (13), Michigan State University (83), Northwestern University (20), Pennsylvania State University (77), University of California, Irvine (99), University of Michigan (21), University of South Carolina (351-400), Western Kentucky University
1	Carl Zeiss SMT Inc, Columbia University (14), Cornell University (19), FAMU FSU Coll Engineering, Florida State University (201-250), Food and Drug Administration, IBM Corporation, The University of Electro-Communications, Medical University of Ohio, North Carolina State University (251-300), Ohio State University (70), Oklahoma State University (501-600), Texas A&M University (159), University of Florida (143), University of Georgia (351-400), University of Minnesota (56), University of Nebraska (301-350), University of Pittsburgh (100), University of Rochester (153), University of South Florida (251-300), University of Tennessee (301-350), The University of Texas at Austin (49), The University of Texas at Southwestern Medical Center Dallas, University of Toledo (501-600)	
中国	48	Ministry of Education
	43	Chinese Academy of Sciences
	21	Dalian University of Technology (601-800)
	20	Central China Normal University (501-600)
	17	Wuhan University (401-500)
	15	Tsing Hua University (30)

13	Nanjing University (169)
11	Shandong University (501-600)
9	University of Science and Technology of China (132)
8	Northeast Normal University (601-800), Soochow University (501-600), University of Hong Kong (40)
7	South China University of Technology (501-600), Xiamen University (401-500)
6	Beihang University (601-800), China University of Geosciences (601-800), Chongqing Technology and Business University, Wuhan University of Technology (801-1000), Zhejiang University (177)
5	Harbin Institute of Technology (501-600), Harbin Normal University, Hong Kong Polytech University (182), South China Normal University, Xi'an Jiaotong University (501-600)
4	Chongqing University (801-1000), Fuzhou University (601-800), Huaibei Normal University, Jilin University, Shanghai Jiao Tong University (188), Tongji University (401-500)
3	Anhui University, Beijing National Lab Mol Science , Chinese University of Hong Kong (76) , City University of Hong Kong (119), Hong Kong University of Science and Technology (44) , Huazhong Normal University, Hunan University (601-800), Jiangsu University (801-1000), Lanzhou University, Nankai University, National Center Nanoscience and Technology, South Central University Nationalities, Shanghai Normal University, University of Science and Technology Beijing (601-800), Wuhan Institute of Technology, Zhejiang Normal University, Zhejiang Sci-Tech University, Zhengzhou University
2	Beijing University Chemical Technology, Donghua University, East China Normal University (501-600), Fudan University (116), Guangdong University, Huazhong University of Science and Technology (401-500), Jiangxi Normal University, Jilin Medical College, Nano and Advanced Material Institute Ltd, Northwestern Polytech University (601-800), Ocean University China (801-1000), Peking University (27) , Tianjin University (501-600)
1	Academia Sinica, Anhui Normal University, Anhui Polytech University, Anhui University of Science and Technology, CECEP Environmental Protect Investment Dev Co Ltd, Changchun University of Science and Technology, Changchun University of Technology, China Institute Atom Energy, China West Normal University, Chinese Research Institute Environmental Science, East China University of Science and Technology (601-800), Engineering Technology Research Center Mot Power and Key Material Henan Pr, Hebei University, Hefei University, Henan Normal University, Henan University, Hong Kong Baptist University (401-500), Hong Kong Institute Educ, Huaqiao University (801-1000), Jiangnan University, Jiangxi University of Science and Technology, Kunming University of Science and Technology, Minnan Normal University, Nanjing University Aeronaut and Astronaut, Nanjing

		University of Technology, Nantong University, Nanyang Normal University (601-800), National Engineering Research Center Nanotechnology, Rizhao Environmental Monitor Station, Shaanxi Normal University (801-1000), Shanghai University (601-800), Shenyang Ligong University, Shenyang University of Technology, South University of Science and Technology of China, State South Central University Nationalities, Taiyuan University of Science and Technology, Tianjin Co Innovation Center Chem Science and Engineering, University of Jinan (801-1000), Wenzhou University, Xiangtan University (801-1000), Xuchang University, Xuzhou Normal University, Yancheng Institute of Technology, Zhengzhou University Aeronaut, Beijing University of Technology, Central South University (601-800)
韓 國	10	Ewha Womans University (501-600)
	9	Yeungnam University (601-800)
	6	Pohang University of Science and Technology (137)
	3	Chonbuk National University
	2	Inha University (601-800)
	1	Hanyang University (351-400), Seoul National University (74) , Ulsan National Institute of Science and Technology (201-250), Wonkwang University
日 本	15	Osaka University (201-250)
	11	Japan Science and Technology Agency
	3	The University of Tokyo (46)
	2	Tokyo Institute of Technology (251-300)
	1	Kyoto University (74) , Nara Institute of Science and Technology, National Institute of Advanced Industrial Science and Technology, Tokyo Chemical Industry Co., Ltd, Toyota Central R&D Labs., Inc., University of Electro-Communications, University of Tsukuba (401-500), University of Yamanashi (801-1000)

付録 B: 4.3 において省略したデータ

本論文の 4.2 の手法を用いて得られた結果のうち、4.3 の結果に掲載していないデータを記載する。

表 B.1 出現論文数上位 100 材料単語の材料区分と登場論文数

材料単語	材料区分	出現論文数	材料単語	材料区分	出現論文数
graphene	カーボン	8736	polyimide	有機	436
epoxy	有機	7980	polyamide	有機	423
carbon nanotube	カーボン	6386	palladium	金属	417
silica (SiO ₂)	セラミック	5741	chromium	金属	391
titanium dioxide (TiO ₂)	セラミック	4382	Co ₃ O ₄	セラミック	368
aluminum	金属	3500	zirconium	金属	361
cellulose	有機	3359	platinum	金属	334
graphite	カーボン	3269	chitin	有機	327
polyaniline (PANi)	有機	2827	LiFePO ₄	セラミック	314
copper	金属	2475	magnesium oxide (MgO)	セラミック	300
aluminum oxide (Al ₂ O ₃)	セラミック	1965	cobalt ferrite (CoFe ₂ O ₄)	セラミック	289
polypropylene	有機	1952	cerium oxide (CeO ₂)	セラミック	279
polyethylene	有機	1863	polylactic acid	有機	257
silver	金属	1703	polysaccharide	有機	234
polyester	有機	1643	fullerene	カーボン	223
zinc oxide (ZnO)	セラミック	1637	polyelectrolyte	有機	219
alumina	セラミック	1527	polycaprolactone	有機	205
nickel	金属	1428	polycarbonate	有機	201
aluminium	金属	1401	polylactide	有機	196
hydrogel	有機	1396	vanadium oxide (V ₂ O ₅)	セラミック	189
diamond	カーボン	1299	calcium chloride (CaCl ₂)	セラミック	159
chitosan	有機	1295	molybdenum trioxide (MoO ₃)	セラミック	159

gold	金属	1221	polyacrylonitrile	有機	153
collagen	有機	1190	melamine	セラミック	143
zeolite	セラミック	1115	polydimethylsiloxane	有機	133
Fe ₃ O ₄	セラミック	971	glucose oxidase	有機	124
polyurethane	有機	927	cyclodextrin	有機	121
polyvinyl alcohol (PVA)	有機	881	polydopamine	有機	115
tin oxide (SnO ₂)	セラミック	836	lithium chloride (LiCl)	セラミック	114
manganese oxide (MnO ₂)	セラミック	802	polyvinylidene	有機	103
carbonitride (C ₃ N ₄)	カーボン	763	silver nitrate (AgNO ₃)	セラミック	95
polypyrrole	有機	722	pyridine	有機	91
molybdenum disulfide (MoS ₂)	セラミック	709	polysiloxane	セラミック	89
silane	セラミック	709	carboxymethyl cellulose	有機	85
polystyrene	有機	707	polythiophene	有機	82
boron carbide (B ₄ C)	カーボン	691	vanadium phosphate	セラミック	74
barium titanate (BaTiO ₃)	セラミック	671	polyacrylamide	有機	73
zirconium dioxide (ZrO ₂)	セラミック	643	polysulfone	有機	71
polymethylmethacrylate (PMMA)	有機	640	kaolinite	セラミック	69
calcium phosphate	セラミック	629	silsesquioxane	セラミック	67
titanium diboride (TiB ₂)	セラミック	542	vinylpyridine	有機	65
Fe ₂ O ₃	セラミック	541	polyolefin	有機	60
polyvinylidene fluoride (PVDF)	有機	534	calcium silicate	セラミック	58
calcium carbonate (CaCO ₃)	セラミック	521	nickel hydroxide	セラミック	57
copper oxide (CuO)	セラミック	473	polybutadiene	有機	57
nickel oxide (NiO)	セラミック	462	polyetherimide	有機	53
polyvinyl chloride (PVC)	有機	454	polyvinylpyrrolidone	有機	51
nylon	有機	453	cadmium sulfide	セラミック	50
Li ₃ V ₂	セラミック	449	FeCl ₃	セラミック	46
boron nitride	セラミック	439	calcium hydroxide	セラミック	41

表 B.2 各 100 材料単語の共起関係を持つ材料単語数

材料単語	共起材料単語数		共起率	材料単語	共起材料単語数		共起率
	2012年	2015年			2012年	2015年	
silica (SiO ₂)	78	85	33.3%	polyacrylonitrile	21	26	6.4%
carbon nanotube	76	82	26.1%	silver nitrate (AgNO ₃)	20	28	10.1%
graphite	64	73	25.7%	polysiloxane	20	23	3.8%
polyethylene	63	74	30.6%	polyvinylidene	20	22	2.5%
titanium dioxide (TiO ₂)	63	70	19.4%	nickel oxide (NiO)	19	26	8.8%
epoxy	62	72	27.0%	tin oxide (SnO ₂)	19	25	7.5%
silane	58	64	14.6%	cerium oxide (CeO ₂)	19	24	6.3%
polystyrene	57	66	21.4%	polyvinyl chloride (PVC)	18	25	8.6%
platinum	57	62	11.9%	FeCl ₃	18	21	3.7%
Polyaniline (PANi)	54	65	24.4%	magnesium oxide (MgO)	17	24	8.5%
copper	52	67	31.9%	polyvinylidene fluoride (PVDF)	17	23	7.3%
silver	50	64	28.6%	polysulfone	16	23	8.4%
alumina	50	62	24.5%	polyvinylpyrrolidone	16	19	3.6%
cellulose	50	60	20.4%	polycaprolactone	16	18	2.4%
nickel	49	57	16.0%	boron nitride	15	23	9.5%
aluminum oxide (Al ₂ O ₃)	47	55	15.4%	polybutadiene	15	17	2.4%
graphene	43	80	66.1%	silsesquioxane	14	24	11.8%
gold	42	48	10.5%	polylactic acid	14	21	8.2%
polyester	40	46	10.2%	polysaccharide	14	21	8.2%
polyvinyl alcohol (PVA)	40	45	8.5%	polydimethylsiloxane	14	19	5.9%
polyurethane	40	44	6.8%	chitin	13	18	5.8%
polypropylene	39	45	10.0%	boron carbide (B ₄ C)	13	16	3.5%
aluminium	39	43	6.7%	titanium diboride (TiB ₂)	13	15	2.3%

polypyrrole	36	42	9.5%	fullerene	12	18	6.9%
zinc oxide (ZnO)	34	44	15.4%	cobalt ferrite (CoFe ₂ O ₄)	12	18	6.9%
calcium phosphate	34	39	7.7%	polythiophene	11	17	6.8%
diamond	31	36	7.4%	cyclodextrin	11	13	2.3%
chitosan	30	46	23.2%	molybdenum disulfide (MoS ₂)	10	23	14.6%
polymethylmethacrylate (PMMA)	30	36	8.7%	LiFePO ₄	10	17	7.9%
barium titanate (BaTiO ₃)	29	34	7.1%	polyacrylamide	10	16	6.7%
nylon	28	31	4.2%	kaolinite	10	14	4.5%
zirconium	27	37	13.9%	polyolefin	10	14	4.5%
polycarbonate	27	30	4.2%	Co ₃ O ₄	9	20	12.2%
zeolite	26	34	11.0%	vanadium oxide (V ₂ O ₅)	9	14	5.6%
platinum	26	33	9.6%	vinylpyridine	9	9	0.0%
zirconium dioxide (ZrO ₂)	26	32	8.2%	melamine	8	12	4.4%
polyamide	26	31	6.8%	carboxymethyl cellulose	7	18	12.0%
polyimide	26	31	6.8%	polylactide	7	14	7.6%
hydrogel	25	35	13.5%	Li ₃ V ₂	7	13	6.5%
palladium	24	33	12.0%	calcium chloride (CaCl ₂)	7	11	4.3%
collagen	24	30	8.0%	polyetherimide	7	10	3.3%
polyelectrolyte	24	26	2.7%	molybdenum trioxide (MoO ₃)	5	13	8.5%
Fe ₃ O ₄	23	39	21.1%	lithium chloride (LiCl)	5	9	4.3%
pyridine	23	27	5.3%	carbon nitride (C ₃ N ₄)	4	13	9.5%
chromium	23	26	3.9%	cadmium sulfide	4	7	3.2%
calcium carbonate (CaCO ₃)	22	26	5.2%	nickel hydroxide	4	4	0.0%
copper oxide (CuO)	21	34	16.7%	polydopamine	3	15	12.5%
Fe ₂ O ₃	21	28	9.0%	calcium hydroxide	3	4	1.0%
glucose oxidase	21	27	7.7%	calcium silicate	1	3	2.0%

manganese oxide (MnO ₂)	21	26	6.4%	vanadium phosphate	1	2	1.0%
				100 単語	2948	3164	3.2%

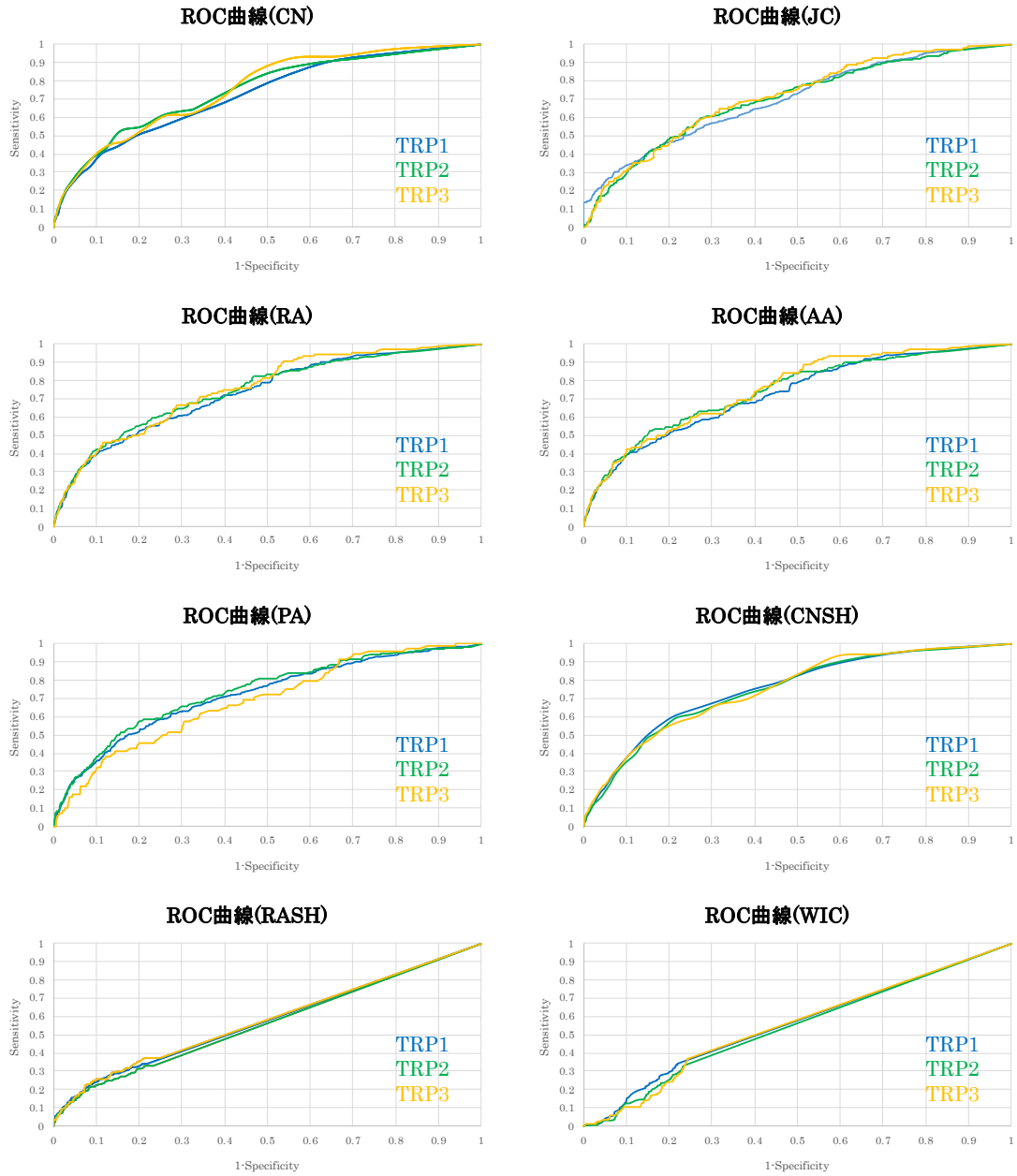


図 B.1 各条件下での ROC 曲線

参考文献

- Abbas, S. M., Hussain, S. T., Ali, S., Abbas, F., Ahmad, N., Ali, N., & Khan, Y. (2013). One-pot synthesis of a composite of monodispersed CuO nanospheres on carbon nanotubes as anode material for lithium-ion batteries. *Journal of Alloys and Compounds*, *574*, 221-226. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2013.04.197> [Last accessed: January 8, 2021]
- Acar, E., Dunlavy, D. M., & Kolda, T. G. (2009). Link prediction on evolving data using matrix and tensor factorizations. *2009 IEEE International Conference on Data Mining Workshops*. <https://doi.org/10.1109/icdmw.2009.54> [Last accessed: August 2, 2021]
- Adamic, L. A., & Adar, E. (2003). Friends and neighbors on the web. *Social Networks*, *25*(3), 211-230. [https://doi.org/10.1016/s0378-8733\(03\)00009-1](https://doi.org/10.1016/s0378-8733(03)00009-1) [Last accessed: January 8, 2021]
- Ahmadpoor, M., & Jones, B. F. (2017). The dual frontier: Patented inventions and prior scientific advance. *Science*, *357*(6351), 583-587. <https://doi.org/10.1126/science.aam9527> [Last accessed: January 8, 2021]
- Ahn, S., Sung, J. S., Kim, H. J., & Sung, Y. K. (2015). Emerging analysis on the preparation and application of Graphene by Bibliometry. *Journal of Material Science & Engineering*, *04*(05), 1-6. <https://doi.org/10.4172/2169-0022.1000192> [Last accessed: May22, 2021]
- Asatani, K., Mori, J., Ochi, M., & Sakata, I. (2018). Detecting trends in academic research from a citation network using network representation learning. *PLOS ONE*, *13*(5), e0197260. <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0197260> [Last accessed: January 8, 2021]
- Asatani, K., Takeda, H., Yamano, H., & Sakata, I. (2020). Scientific attention to sustainability and SDGs: Meta-analysis of academic papers. *Energies*, *13*(4), 975. <https://doi.org/10.3390/en13040975> [Last accessed: January 8, 2021]
- Aspdin, J. (1871). Improvement in pavements—Artificial stone flagging for sidewalks. *Scientific American*, *25*(20), 312-312. <https://doi.org/10.1038/scientificamerican11111871-312c> [Last accessed: January 8, 2021]
- Bai, M., Hu, K., & Tang, Y. (2011). Link prediction based on a semi-local similarity index. *Chinese Physics B*, *20*(12), 128902. <https://doi.org/10.1088/1674-1056/20/12/128902> [Last accessed: January 8, 2021]
- Bakshi, S. R., Lahiri, D., & Agarwal, A. (2013). Carbon nanotube reinforced metal matrix composites - a review. *International Materials Review*, *55*(1), 41-64. <https://doi.org/10.1179/095066009X12572530170543> [Last accessed: January 8, 2021]

- Baly, E. C., Heilbron, I. M., & Barker, W. F. (1921). CX.—Photocatalysis. Part I. The synthesis of formaldehyde and carbohydrates from carbon dioxide and water. *J. Chem. Soc., Trans*, 119(0), 1025-1035. <https://doi.org/10.1039/ct9211901025> [Last accessed: January 8, 2021]
- Becker, I. H. (1957). Low voltage electrolytic capacitor. *U. S. Patent*, US2800616A. <https://bit.ly/3bhVhpy> [Last accessed: January 8, 2021]
- Biringuccio, V. (1540). *De la Pirotechnia*.
- Bornmann, L., & Mutz, R. (2015). Growth rates of modern science: A bibliometric analysis based on the number of publications and cited references. *Journal of the Association for Information Science and Technology*, 66(11), 2215-2222. <https://doi.org/10.1002/asi.23329> [Last accessed: January 8, 2021]
- Boyack, K. W., Klavans, R., & Börner, K. (2005). Mapping the backbone of science. *Scientometrics*, 64(3), 351-374. <https://doi.org/10.1007/s11192-005-0255-6> [Last accessed: January 8, 2021]
- Bradley, A. P. (1997). The use of the area under the ROC curve in the evaluation of machine learning algorithms. *Pattern Recognition*, 30(7), 1145-1159. [https://doi.org/10.1016/s0031-3203\(96\)00142-2](https://doi.org/10.1016/s0031-3203(96)00142-2) [Last accessed: January 8, 2021]
- Börner, K., Chen, C., & Boyack, K. W. (2005). Visualizing knowledge domains. *Annual Review of Information Science and Technology*, 37(1), 179-255. <https://doi.org/10.1002/aris.1440370106> [Last accessed: January 8, 2021]
- Cao, R. M., Liu, S. Y., & Xu, X. K. (2019). Network embedding for link prediction: The pitfall and improvement. *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science*, 29(10). <https://doi.org/10.1063/1.5120724> [Last accessed: August 2, 2021]
- Chen, C. (2004). Searching for intellectual turning points: Progressive knowledge domain visualization. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 101(Supplement 1), 5303-5310. <https://doi.org/10.1073/pnas.0307513100> [Last accessed: January 8, 2021]
- Chen, C. (2006). *Information visualization: Beyond the horizon*. Springer Science & Business Media.
- Chen, H., Hu, L., Chen, M., Yan, Y., & Wu, L. (2013). Nickel-Cobalt layered double hydroxide Nanosheets for high-performance supercapacitor electrode materials. *Advanced Functional Materials*, 24(7), 934-942. <https://doi.org/10.1002/adfm.201301747> [Last accessed: January 8, 2021]
- Chu, H., Zhang, Z., Liu, Y., & Leng, J. (2015). Self-response multi-functional composite material base on carbon nanotube paper using deicing, flame retardancy, thermal insulation, and lightning-strike protection. *Behavior and Mechanics of Multifunctional Materials and*

- Composites 2015*, 9432, 94320S. <https://doi.org/10.1117/12.2084258> [Last accessed: January 8, 2021]
- Clarivate. *Web of Science*. <https://bit.ly/2MKLWN7> [Last accessed: January 8, 2021]
- Coleman, J. N., Khan, U., Blau, W. J., & Gun'ko, Y. K. (2006). Small but strong: A review of the mechanical properties of carbon nanotube–polymer composites. *Carbon*, 44(9), 1624-1652. <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2006.02.038> [Last accessed: January 8, 2021]
- Coronado, J. M., Fresno, F., Hernández-Alonso, M. D., & Portela, R. (2013). Design of advanced photocatalytic materials for energy and environmental applications. *Springer Science & Business Media*.
- Cruz-Silva, R., Takizawa, Y., Nakaruk, A., Katouda, M., Yamanaka, A., Ortiz-Medina, J., Morelos-Gomez, A., Tejima, S., Obata, M., Takeuchi, K., Noguchi, T., Hayashi, T., Terrones, M., & Endo, M. (2019). New insights in the natural organic matter fouling mechanism of polyamide and Nanocomposite Multiwalled carbon nanotubes-polyamide membranes. *Environmental Science & Technology*, 53(11), 6255-6263. <https://doi.org/10.1021/acs.est.8b07203> [Last accessed: January 8, 2021]
- Delaware, W. (2000). The establishment of modern polymer science by Wallace H. Carothers: An international historic chemical landmark. <https://www.acs.org/content/dam/acsorg/education/whatischemistry/landmarks/carotherspolymers/modern-polymer-science-wallace-h-carothers-historical-resource.pdf> [Last accessed: January 8, 2021]
- Ding, H., Zhang, S., Chen, J., Hu, X., Du, Z., Qiu, Y., & Zhao, D. (2015). Reduction of graphene oxide at room temperature with vitamin C for RGO–TiO₂ photoanodes in dye-sensitized solar cell. *Thin Solid Films*, 584, 29-36. <https://doi.org/10.1016/j.tsf.2015.02.038> [Last accessed: January 8, 2021]
- Ding, X., Liu, H., & Fan, Y. (2015). Graphene-based materials in regenerative medicine. *Advanced Healthcare Materials*, 4(10), 1451-1468. <https://doi.org/10.1002/adhm.201500203> [Last accessed: January 8, 2021]
- Donnat, C., Zitnik, M., Hallac, D., & Leskovec, J. (2018). Learning structural node embeddings via diffusion wavelets. *Proceedings of the 24th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery & Data Mining*, 1320-1329. <https://doi.org/10.1145/3219819.3220025> [Last accessed: January 8, 2021]

- Doreswamy, H., & Vanajaskhi, M. (2010). Similarity measuring approach for engineering materials selection. *International Journal of Computational Intelligence Systems*, 3(1), 115.
<https://doi.org/10.2991/ijcis.2010.3.1.11> [Last accessed: January 8, 2021]
- Duan, A., Li, T., Zhao, Z., Liu, B., Zhou, X., Jiang, G., & Pan, H. (2015). Synthesis of hierarchically porous L-KIT-6 silica–alumina material and the super catalytic performances for hydrodesulfurization of benzothiophene. *Applied Catalysis B: Environmental*, 165, 763-773.
<https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2014.10.078> [Last accessed: January 8, 2021]
- Eibner, A. (1911). Action of Light on Pigments I. *Chem-ZTG*, 35, 753-755.
- Evans, D. A. (1994). Capacitor. *U. S. Patent*, US5369547A. <https://bit.ly/3hQQAEJ> [Last accessed: January 8, 2021]
- Evans, D. A. (1994). High Energy Density Electrolytic-Electrochemical Hybrid Capacitor.
<https://bit.ly/3oo7yg7> [Last accessed: January 8, 2021]
- FDK. (2015). FDK history -2000s-. *FDK website*. https://www.fdk.com/company_e/ayumi2000-e.html
 [Last accessed: August 5, 2021]
- Friedman, L., Pierre-Louis, K., & Sengupta, S. (2018). The meat question, by the numbers. *The New York Times*. <https://www.nytimes.com/2018/01/25/climate/cows-global-warming.html> [Last accessed: January 8, 2021]
- Fujishima, A., & Honda, K. (1972). Electrochemical photolysis of water at a semiconductor electrode. *Nature*, 238(5358), 37-38. <https://doi.org/10.1038/238037a0> [Last accessed: January 8, 2021]
- Fujisue, C., Kadoya, T., Higashino, T., Sato, R., Kawamoto, T., & Mori, T. (2016). Air-stable ambipolar organic transistors based on charge-transfer complexes containing dibenzopyrrolopyrrole. *RSC Advances*, 6(58), 53345-53350.
<https://doi.org/10.1039/c6ra10606d> [Last accessed: January 8, 2021]
- Fujisue, C., & Sakata, I. (2017). Detection of emerging technologies for Field effect transistors: A citation-based analysis. *2017 Portland International Conference on Management of Engineering and Technology (PICMET)*. <https://doi.org/10.23919/picmet.2017.8125280> [Last accessed: January 8, 2021]
- Fujisue, C., Sasaki, H., Yamano, H., & Sakata, I. (2018). Co-word analysis to detect possible combinations for composite materials. *2018 Portland International Conference on Management of Engineering and Technology (PICMET)*.
<https://doi.org/10.23919/picmet.2018.8481973> [Last accessed: January 8, 2021]

- Fujita, K., Kajikawa, Y., Mori, J., & Sakata, I. (2014). Detecting research fronts using different types of weighted citation networks. *Journal of Engineering and Technology Management*, *32*, 129-146. <https://doi.org/10.1016/j.jengtecman.2013.07.002> [Last accessed: January 8, 2021]
- Gharehbas, N., & Shakeri, A. (2015). Preparation and thermal and physical properties of nano-silica modified and unmodified. *Oriental Journal of Chemistry*, *31*(Special Issue 1(2015)), 207-212. <https://doi.org/10.13005/ojc/31.special-issue1.25> [Last accessed: January 8, 2021]
- Ghosh, S., Calizo, I., Teweldebrhan, D., Pokatilov, E. P., Nika, D. L., Balandin, A. A., & Lau, C. N. (2008). Extremely high thermal conductivity of graphene: Prospects for thermal management applications in nanoelectronic circuits. *Applied Physics Letters*, *92*(15), 151911. <https://doi.org/10.1063/1.2907977> [Last accessed: January 8, 2021]
- Godin, B. (2006). The linear model of innovation. *Science, Technology, & Human Values*, *31*(6), 639-667. <https://doi.org/10.1177/0162243906291865> [Last accessed: January 8, 2021]
- Gong, W., Fugetsu, B., Wang, Z., Sakata, I., Su, L., Zhang, X., Ogata, H., Li, M., Wang, C., Li, J., Ortiz-Medina, J., Terrones, M., & Endo, M. (2018). Carbon nanotubes and manganese oxide hybrid nanostructures as high performance fiber supercapacitors. *Communications Chemistry*, *1*(1). <https://doi.org/10.1038/s42004-018-0017-z> [Last accessed: January 8, 2021]
- Gong, W., Fugetsu, B., Wang, Z., Ueki, T., Sakata, I., Ogata, H., Han, F., Li, M., Su, L., Zhang, X., Terrones, M., & Endo, M. (2019). Thicker carbon-nanotube/manganese-oxide hybridized nanostructures as electrodes for the creation of fiber-shaped high-energy-density supercapacitors. *Carbon*, *154*, 169-177. <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2019.08.004> [Last accessed: January 8, 2021]
- Goodeve, C. F., & Kitchener, J. A. (1938). The mechanism of photosensitisation by solids. *Transactions of the Faraday Society*, *34*, 902. <https://doi.org/10.1039/tf9383400902> [Last accessed: January 8, 2021]
- Goodyear Corporate. The Charles Goodyear Story. *Goodyear corporate website*. <https://corporate.goodyear.com/en-US/about/history/charles-goodyear-story.html> [Last accessed: January 8, 2021]
- Grover, A., & Leskovec, J. (2016). Node2vec. *Proceedings of the 22nd ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining*. <https://doi.org/10.1145/2939672.2939754> [Last accessed: January 8, 2021]
- Han, S., & Xu, Y. (2016). Link prediction in Microblog network using supervised learning with multiple features. *Journal of Computers*, *11*(1), 72-82. <https://doi.org/10.17706/jcp.11.1.72-82> [Last accessed: August 5, 2021]

- Harrop, P. (2018). Supercapacitor materials and technology roadmap 2019-2039. *IDTechEx*.
<https://www.idtechex.com/en/research-report/supercapacitor-materials-and-technology-roadmap-2019-2039/611> [Last accessed: January 8, 2021]
- Hassan, A. M., Alrashdan, A., Hayajneh, M. T., & Mayyas, A. T. (2009). Prediction of density, porosity and hardness in aluminum–copper-based composite materials using artificial neural network. *Journal of Materials Processing Technology*, *209*(2), 894-899.
<https://doi.org/10.1016/j.jmatprotec.2008.02.066> [Last accessed: January 8, 2021]
- Hey, T., Tansley, S., & Tolle, K. (2018). The fourth paradigm: Data-intensive scientific discovery. Microsoft Research. <https://www.microsoft.com/en-us/research/publication/fourth-paradigm-data-intensive-scientific-discovery/> [Last accessed: January 8, 2021]
- Hu, S., Wang, H., Wang, F., Bai, J., Zhang, L., Kang, X., & Wu, G. (2015). Practical preparation of carbon black/carbon nitride compounds and their photocatalytic performance. *Bulletin of the Korean Chemical Society*, *36*(10), 2527-2533. <https://doi.org/10.1002/bkcs.10491> [Last accessed: January 8, 2021]
- Humphreys, B. L., Lindberg, D. A., Schoolman, H. M., & Barnett, G. O. (1998). The unified medical language system: An informatics research collaboration. *Journal of the American Medical Informatics Association*, *5*(1), 1-11. <https://doi.org/10.1136/jamia.1998.0050001> [Last accessed: January 8, 2021]
- Jaccard, P. (1901). Etude comparative de la distribution florale dans une portion des alpes et du Jura. *Bulletin de la Societe Vaudoise des Sciences Naturelles*. *37*(142), 547-579.
<https://doi.org/10.5169/SEALS-266450> [Last accessed: January 8, 2021]
- Jiang, G., & Yang, Y. (2017). Preparation and tribology properties of water-soluble fullerene derivative nanoball. *Arabian Journal of Chemistry*, *10*(1), S870-S876.
<https://doi.org/10.1016/j.arabjc.2012.12.022> [Last accessed: January 8, 2021]
- Jo, G., Choe, M., Lee, S., Park, W., Kahng, Y. H., & Lee, T. (2012). The application of graphene as electrodes in electrical and optical devices. *Nanotechnology*, *23*(11), 112001.
<https://doi.org/10.1088/0957-4484/23/11/112001> [Last accessed: January 8, 2021]
- Jung, H., Moon, J., Baek, D., Lee, J., Choi, Y., Hong, J., & Lee, S. (2012). CNT/PDMS composite flexible dry Electrodesfor long-term ECG monitoring. *IEEE Transactions on Biomedical Engineering*, *59*(5), 1472-1479. <https://doi.org/10.1109/tbme.2012.2190288> [Last accessed: January 8, 2021]
- Kajikawa, Y. (2008). Research core and framework of sustainability science. *Sustainability Science*, *3*(2), 215-239. <https://doi.org/10.1007/s11625-008-0053-1> [Last accessed: January 8, 2021]

- Kajikawa, Y., Ohno, J., Takeda, Y., Matsushima, K., & Komiyama, H. (2007). Creating an academic landscape of sustainability science: An analysis of the citation network. *Sustainability Science*, 2(2), 221-231. <https://doi.org/10.1007/s11625-007-0027-8> [Last accessed: January 8, 2021]
- Kajikawa, Y., & Takeda, Y. (2009). Citation network analysis of organic LEDs. *Technological Forecasting and Social Change*, 76(8), 1115-1123. <https://doi.org/10.1016/j.techfore.2009.04.004> [Last accessed: January 8, 2021]
- Kashima, H., & Abe, N. (2006). A Parameterized probabilistic model of network evolution for supervised link prediction. *Sixth International Conference on Data Mining (ICDM'06)*. <https://doi.org/10.1109/icdm.2006.8> [Last accessed: January 8, 2021]
- Kitano, H., Takeuchi, K., Ortiz-Medina, J., Cruz-Silva, R., Morelos-Gomez, A., Fujii, M., Obata, M., Yamanaka, A., Tejima, S., Fujishige, M., Akuzawa, N., Yamaguchi, A., & Endo, M. (2019). Enhanced antifouling feed spacer made from a carbon nanotube–polypropylene Nanocomposite. *ACS Omega*, 4(13), 15496-15503. <https://doi.org/10.1021/acsomega.9b01757> [Last accessed: January 8, 2021]
- Klavans, R., & Boyack, K. W. (2005). Identifying a better measure of relatedness for mapping science. *Journal of the American Society for Information Science and Technology*, 57(2), 251-263. <https://doi.org/10.1002/asi.20274> [Last accessed: January 8, 2021]
- Kuhn, T. S. (2012). The structure of scientific revolutions: 50th anniversary edition. *University of Chicago Press*.
- Kumar, S., & Chen, S. (2008). Electroanalysis of NADH using conducting and redox active polymer/Carbon nanotubes modified Electrodes-A review. *Sensors*, 8(2), 739-766. <https://doi.org/10.3390/s8020739> [Last accessed: January 8, 2021]
- Lande, D., Fu, M., Guo, W., Balagura, I., Gorbov, I., & Yang, H. (2020). Link prediction of scientific collaboration networks based on information retrieval. *World Wide Web*, 23(4), 2239-2257. <https://doi.org/10.1007/s11280-019-00768-9> [Last accessed: January 8, 2021]
- Leydesdorff, L., & Etzkowitz, H. (1996). Emergence of a triple helix of university—industry—government relations. *Science and Public Policy*, 23, 279-286. <https://doi.org/10.1093/spp/23.5.279> [Last accessed: January 8, 2021]
- Leydesdorff, L., & Rafols, I. (2009). A global map of science based on the ISI subject categories. *Journal of the American Society for Information Science and Technology*, 60(2), 348-362. <https://doi.org/10.1002/asi.20967> [Last accessed: January 8, 2021]

- Liben-Nowell, D., & Kleinberg, J. (2003). The link prediction problem for social networks. *Proceedings of the twelfth international conference on Information and knowledge management - CIKM '03*. <https://doi.org/10.1145/956863.956972> [Last accessed: January 8, 2021]
- Lilienfeld, J. E. (1930). Method and apparatus for controlling electric currents. *U. S. Patent*, US140363A. <https://patentimages.storage.googleapis.com/fa/5d/33/ed2769d48fac4d/US1745175.pdf> [Last accessed: January 8, 2021]
- Hwang, G. L., & Hwang, K. C. (2001). Carbon nanotube reinforced ceramics. *Journal of Materials Chemistry*, *11*(6), 1722-1725. <https://doi.org/10.1039/b101294k> [Last accessed: January 8, 2021]
- Lin, L. (2019). About 80% of smart wearables are made in Shenzhen: Report. *KrASIA*. <https://kr-asia.com/about-80-of-smart-wearables-are-made-in-shenzhen-report> [Last accessed: January 8, 2021]
- Lin, Y. M., Garcia, A. V., Han, S. J., Farmer, D. B., Meric, I., Sun, Y., Wu, Y., Dimitrakopoulos, C., Grill, A., Avouris, P., & Jenkis, K. A. (2011). Wafer-Scale Graphene Integrated Circuit. *Science*, *332*(6035), 1294-1297. <https://doi.org/10.1126/science.1204428> [Last accessed: January 8, 2021]
- Liu, R., Yabansu, Y. C., Agrawal, A., Kalidindi, S. R., & Choudhary, A. N. (2015). Machine learning approaches for elastic localization linkages in high-contrast composite materials. *Integrating Materials and Manufacturing Innovation*, *4*(1), 192-208. <https://doi.org/10.1186/s40192-015-0042-z> [Last accessed: January 8, 2021]
- Liu, S., Yan, H., Fang, Z., Guo, Z., & Wang, H. (2014). Effect of graphene nanosheets and layered double hydroxides on the flame retardancy and thermal degradation of epoxy resin. *RSC Adv*, *4*(36), 18652-18659. <https://doi.org/10.1039/c4ra01267d> [Last accessed: January 8, 2021]
- Lorrain, F., & White, H. C. (1977). Structural equivalence of individuals in social networks. *Social Networks*, *1*(1), 67-98. <https://doi.org/10.1016/b978-0-12-442450-0.50012-2> [Last accessed: January 8, 2021]
- Marcotte, E. M. (1999). Detecting protein function and protein-protein interactions from genome sequences. *Science*, *285*(5428), 751-753. <https://doi.org/10.1126/science.285.5428.751> [Last accessed: January 8, 2021]
- Martel, R., Schmidt, T., Shea, H. R., Hertel, T., & Avouris, P. (1998). Single- and multi-wall carbon nanotube field-effect transistors. *Applied Physics Letters*, *73*(17), 2447-2449. <https://doi.org/10.1063/1.122477> [Last accessed: August 2, 2021]

- Matsumoto, R., Hou, Z., Hara, H., Adachi, S., Takeya, H., Irifune, T., Terakura, K., & Takano, Y. (2018). Two pressure-induced superconducting transitions in SnBi₂Se₄ explored by data-driven materials search: New approach to developing novel functional materials including thermoelectric and superconducting materials. *Applied Physics Express*, *11*(9), 093101. <https://doi.org/10.7567/apex.11.093101> [Last accessed: January 8, 2021]
- Matsuo, Y., Maruyama, D., & Goto, T. (2020). Entire Japan Inc to be outspent by 5 US tech giants in R&D. *Nikkei Asia*. <https://asia.nikkei.com/Spotlight/Datawatch/Entire-Japan-Inc-to-be-outspent-by-5-US-tech-giants-in-R-D> [Last accessed: January 8, 2021]
- MatWeb. *MatWeb*. <https://www.matweb.com/> [Last accessed: January 8, 2021]
- Mejia, C., & Kajikawa, Y. (2020). Emerging topics in energy storage based on a large-scale analysis of academic articles and patents. *Applied Energy*, *263*, 114625. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2020.114625> [Last accessed: January 8, 2021]
- Metz, C. E. (1978). Basic principles of ROC analysis. *Seminars in Nuclear Medicine*, *8*(4), 283-298. [https://doi.org/10.1016/s0001-2998\(78\)80014-2](https://doi.org/10.1016/s0001-2998(78)80014-2) [Last accessed: February 8, 2021]
- Menon, A. K., & Elkan, C. (2011). Link prediction via matrix factorization. *Machine Learning and Knowledge Discovery in Databases*, 437-452. https://doi.org/10.1007/978-3-642-23783-6_28 [Last accessed: January 8, 2021]
- Mo, Y., Ong, S. P., & Ceder, G. (2011). First principles study of the Li₁₀GeP₂S₁₂ lithium super Ionic conductor material. *Chemistry of Materials*, *24*(1), 15-17. <https://doi.org/10.1021/cm203303y> [Last accessed: January 8, 2021]
- Moss, F. (2011). The sorcerers and their apprentices: How the digital magicians of the MIT media lab are creating the innovative technologies that will transform our lives. *Crown Business*.
- Mudark, B. (2016). A look back at global and National Trends in Research Publication. *AJE*. <https://www.aje.com/arc/scholarly-publishing-trends-2016/> [Last accessed: January 8, 2021]
- Nakamura, H., Suzuki, S., Sakata, I., & Kajikawa, Y. (2015). Knowledge combination modeling: The measurement of knowledge similarity between different technological domains. *Technological Forecasting and Social Change*, *94*, 187-201. <https://doi.org/10.1016/j.techfore.2014.09.009> [Last accessed: January 8, 2021]
- National Research Council, Division on Earth and Life Studies, Board on Agriculture and Natural Resources, Committee on Animal Nutrition, & Subcommittee on Dog and Cat Nutrition. (2006). *Nutrient requirements of dogs and cats*. National Academies Press. <https://doi.org/10.17226/10668> [Last accessed: August 2, 2021]

- National Aeronautics and Space Administration (NASA). (2006). Fire-resistant reinforcement makes steel structures sturdier. *NASA spinoff*. https://spinoff.nasa.gov/Spinoff2006/ps_3.html [Last accessed: January 8, 2021]
- National Research Council (NRC). (2011). Materials needs and research and development strategy for future military aerospace propulsion systems. *The National Academies Press*. <https://doi.org/10.17226/13144> [Last accessed: January 8, 2021]
- Newman, M. E. (2001). Clustering and preferential attachment in growing networks. *Physical Review E*, *64*(2). <https://doi.org/10.1103/physreve.64.025102> [Last accessed: January 8, 2021]
- Newman, M. E. (2004). Analysis of weighted networks. *Physical Review E*, *70*(056131). <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.70.056131> [Last accessed: January 8, 2021]
- Newman, M. E. (2004). Fast algorithm for detecting community structure in networks. *Physical Review E*, *69*(6). <https://doi.org/10.1103/physreve.69.066133> [Last accessed: January 8, 2021]
- Nishijima, M., Ootani, T., Kamimura, Y., Sueki, T., Esaki, S., Murai, S., & Tanaka, I. (2014). Accelerated discovery of cathode materials with prolonged cycle life for lithium-ion battery. *Nature Communications*, *5*(1). <https://doi.org/10.1038/ncomms5553> [Last accessed: January 8, 2021]
- Noguchi, T., Endo, M., Niihara, K., Jinnai, H., & Isogai, A. (2020). Cellulose nanofiber/elastomer composites with high tensile strength, modulus, toughness, and thermal stability prepared by high-shear kneading. *Composites Science and Technology*, *188*, 108005. <https://doi.org/10.1016/j.compscitech.2020.108005> [Last accessed: January 8, 2021]
- Novoselov, K. S. (2004). Electric Field effect in Atomically thin carbon films. *Science*, *306*(5696), 666-669. <https://doi.org/10.1126/science.1102896> [Last accessed: January 8, 2021]
- Peters, D. P., & Ceci, S. J. (1982). Peer-review practices of psychological journals: The fate of published articles, submitted again. *Behavioral and Brain Sciences*, *5*(2), 187-195. <https://doi.org/10.1017/s0140525x00011183> [Last accessed: January 8, 2021]
- Predtechensky, M., & Koropachinsky, Y. (2014). *SF Bay Area nanotechnology council*. <https://site.ieee.org/sfbanano/2014/04/24/low-cost-scalable-production-and-applications-of-single-walled-carbon-nanotubes/> [Last accessed: January 8, 2021]
- Qiao, Y., Tu, J., Mai, Y., Cheng, L., Wang, X., & Gu, C. (2011). Enhanced electrochemical performances of multi-walled carbon nanotubes modified $\text{Li}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3/\text{C}$ cathode material for lithium-ion batteries. *Journal of Alloys and Compounds*, *509*(25), 7181-7185. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2011.04.048> [Last accessed: January 8, 2021]

- Rafols, I., Porter, A. L., & Leydesdorff, L. (2010). Science overlay maps: A new tool for research policy and library management. *Journal of the American Society for Information Science and Technology*, *61*(9), 1871-1887. <https://doi.org/10.1002/asi.21368> [Last accessed: January 8, 2021]
- Research and Market. (2019). Global and China fuel cell industry chain market report 2019–2025 featuring 10 Chinese fuel cell system manufacturers and 10 suppliers on the industry chain. *Focus on Catalysts*, *2019*(9), 2. <https://doi.org/10.1016/j.focat.2019.08.007> [Last accessed: January 8, 2021]
- Rodgers, J. R., & Cebon, D. (2006). Materials Informatics. *MRS Bulletin*, *31*(12), 975-980. <https://doi.org/10.1557/mrs2006.223> [Last accessed: January 8, 2021]
- Romero, A. I., Parentis, M. L., Habert, A. C., & Gonzo, E. E. (2011). Synthesis of polyetherimide/silica hybrid membranes by the sol–gel process: Influence of the reaction conditions on the membrane properties. *Journal of Materials Science*, *46*(13), 4701-4709. <https://doi.org/10.1007/s10853-011-5380-4> [Last accessed: January 8, 2021]
- Rotolo, D., Hicks, D., & Martin, B. (2015). What is an emerging technology? *Research Policy*, *44*(10), 1827-1843. <https://doi.org/10.1016/j.respol.2015.06.006> [Last accessed: January 8, 2021]
- Rzhetsky, A., Foster, J. G., Foster, I. T., & Evans, J. A. (2015). Choosing experiments to accelerate collective discovery. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, *112*(47), 14569-14574. <https://doi.org/10.1073/pnas.1509757112> [Last accessed: January 8, 2021]
- Saeys, Y., Inza, I., & Larranaga, P. (2007). A review of feature selection techniques in bioinformatics. *Bioinformatics*, *23*(19), 2507-2517. <https://doi.org/10.1093/bioinformatics/btm344> [Last accessed: January 8, 2021]
- Saka, A., & Igami, M. (2014). Science Map 2010&2012 Study on Hot Research Area (2005 – 2010 and 2007- 2012) By Bibliometric Method. *NISTEP Report*, *159*. <https://www.nistep.go.jp/en/wp-content/uploads/NISTEP-NR159-SummaryE1.pdf> [Last accessed: January 8, 2021]
- Sakata, T., & Kawai, T. (1981). Heterogeneous photocatalytic production of hydrogen and methane from ethanol and water. *Chemical Physics Letters*, *80*(2), 341-344. [https://doi.org/10.1016/0009-2614\(81\)80121-2](https://doi.org/10.1016/0009-2614(81)80121-2) [Last accessed: January 8, 2021]
- Sampat, B. N. (2006). Patenting and US academic research in the 20th century: The world before and after bayh-dole. *Research Policy*, *35*(6), 772-789. <https://doi.org/10.1016/j.respol.2006.04.009> [Last accessed: January 8, 2021]
- Sasaki, H., Hara, T., & Sakata, I. (2016). Prediction of emerging papers in nanocarbon materials-related research using a citation network. *2016 Portland International Conference on*

- Management of Engineering and Technology (PICMET)*.
<https://doi.org/10.1109/picmet.2016.7806701> [Last accessed: January 8, 2021]
- Sasaki, H., & Sakata, I. (2020). Identifying potential technological spin-offs using hierarchical information in international patent classification. *Technovation*, 102192.
<https://doi.org/10.1016/j.technovation.2020.102192> [Last accessed: January 8, 2021]
- Schuurs, A. H., Gruythuysen, R. J., & Wesselink, P. R. (2000). Pulp capping with adhesive resin-based composites vs. calcium hydroxide: A review. *Dental Traumatology*, 16(6), 240-250.
<https://doi.org/10.1034/j.1600-9657.2000.016006240.x> [Last accessed: January 8, 2021]
- Seifollahzadeh, P., Kalantar, M., & Ghasemi, S. (2015). Structure-property relationships of mullite-silic-Al₂O₃-ZrO₂ composites developed during carbothermal reduction of aluminosilicate minerals. *Journal of Alloys and Compounds*, 647, 973-980.
<https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2015.06.028> [Last accessed: January 8, 2021]
- Sha, R., Komori, K., & Badhulika, S. (2017). Graphene-polyaniline composite based ultra-sensitive electrochemical sensor for non-enzymatic detection of urea. *Electrochimica Acta*, 233, 44-51.
<https://doi.org/10.1016/j.electacta.2017.03.043> [Last accessed: January 8, 2021]
- Shafiee, S., & Topal, E. (2009). When will fossil fuel reserves be diminished? *Energy Policy*, 37(1), 181-189. <https://doi.org/10.1016/j.enpol.2008.08.016> [Last accessed: May 20, 2021]
- Shibata, N., Kajikawa, Y., Takeda, Y., & Matsushima, K. (2009). Comparative study on methods of detecting research fronts using different types of citation. *Journal of the American Society for Information Science and Technology*, 60(3), 571-580. <https://doi.org/10.1002/asi.20994> [Last accessed: January 8, 2021]
- Shibata, N., Kajikawa, Y., & Sakata, I. (2010). Extracting the commercialization gap between science and technology — Case study of a solar cell. *Technological Forecasting and Social Change*, 77(7), 1147-1155. <https://doi.org/10.1016/j.techfore.2010.03.008> [Last accessed: January 8, 2021]
- Shirakawa, H., Louis, E. J., MacDiarmid, A. G., Chiang, C. K., & Heeger, A. J. (1977). Synthesis of electrically conducting organic polymers: Halogen derivatives of polyacetylene, (CH) X. *Journal of the Chemical Society, Chemical Communications*, (16), 578.
<https://doi.org/10.1039/c39770000578> [Last accessed: August 2, 2021]
- Singh, E., & Nalwa, H. S. (2015). Stability of graphene-based heterojunction solar cells. *RSC Advances*, 5(90), 73575-73600. <https://doi.org/10.1039/c5ra11771b> [Last accessed: January 8, 2021]

- Somodi, F., Kong, C. S., Santos, J. C., & Morse, D. E. (2015). Vesicular hydrogen silsesquioxane-mediated synthesis of nanocrystalline silicon dispersed in a mesoporous silica/suboxide matrix, with potential for electrochemical applications. *New Journal of Chemistry*, *39*(1), 621-630. <https://doi.org/10.1039/c4nj01762e> [Last accessed: January 8, 2021]
- Soni, S. (2019). MSMEs in nanotechnology: Why graphene is 'wonder material' for small businesses. *Financial Express*. <https://www.financialexpress.com/industry/sme/weekly-sme-msmes-in-nanotechnology-why-graphene-is-wonder-material-for-small-businesses/1710243/> [Last accessed: January 8, 2021]
- Soundarajan, S., & Hopcroft, J. (2012). Using community information to improve the precision of link prediction methods. *Proceedings of the 21st international conference companion on World Wide Web - WWW '12 Companion*, 607-608. <https://doi.org/10.1145/2187980.2188150> [Last accessed: January 8, 2021]
- Standard Graphene. (2020). Home. *Standard Graphene website*. <https://standardgraphene.com/> [Last accessed: January 8, 2021]
- Stanford University. (2018). Stanford University Annual Financial Report. https://bondholder-information.stanford.edu/pdf/SU_AnnualFinancialReport_2018.pdf [Last accessed: January 8, 2021]
- Sun, Y., Bigi, J. P., Piro, N. A., Tang, M. L., Long, J. R., & Chang, C. J. (2011). Molecular Cobalt Pentapyridine catalysts for generating hydrogen from water. *Journal of the American Chemical Society*, *133*(24), 9212-9215. <https://doi.org/10.1021/ja202743r> [Last accessed: January 8, 2021]
- Suzuki, T., & Takahashi, J. (2005). LCA of lightweight vehicles by using CFRP for mass-product vehicles. <https://j-t.o.oo7.jp/publications/050627TS.pdf> [Last accessed: January 8, 2021]
- Svitan'ko, A., Scopets, V., Novikova, S., & Yaroslavtsev, A. (2015). The effect of composite formation with oxides on the ion conductivity of NASICON-type $\text{LiTi}_2(\text{PO}_4)_3$ and olivine-type LiFePO_4 . *Solid State Ionics*, *271*, 42-47. <https://doi.org/10.1016/j.ssi.2014.10.022> [Last accessed: January 8, 2021]
- Takeda, Y., Mae, S., Kajikawa, Y., & Matsushima, K. (2009). Nanobiotechnology as an emerging research domain from nanotechnology: A bibliometric approach. *Scientometrics*, *80*(1), 23-38. <https://doi.org/10.1007/s11192-007-1897-3> [Last accessed: January 8, 2021]
- Takeuchi, K., Takizawa, Y., Kitazawa, H., Fujii, M., Hosaka, K., Ortiz-Medina, J., Morelos-Gomez, A., Cruz-Silva, R., Fujishige, M., Akuzawa, N., & Endo, M. (2018). Salt rejection behavior of carbon nanotube-polyamide nanocomposite reverse osmosis membranes in several salt

- solutions. *Desalination*, *443*, 165-171. <https://doi.org/10.1016/j.desal.2018.04.021> [Last accessed: January 8, 2021]
- Takizawa, Y., Inukai, S., Araki, T., Cruz-Silva, R., Ortiz-Medina, J., Morelos-Gomez, A., Tejima, S., Yamanaka, A., Obata, M., Nakaruk, A., Takeuchi, K., Hayashi, T., Terrones, M., & Endo, M. (2018). Effective Antiscalant performance of reverse-osmosis membranes made of carbon nanotubes and polyamide Nanocomposites. *ACS Omega*, *3*(6), 6047-6055. <https://doi.org/10.1021/acsomega.8b00601> [Last accessed: January 8, 2021]
- Tang, J., Liu, J., Zhang, M., & Mei, Q. (2016). Visualizing large-scale and high-dimensional data. *Proceedings of the 25th International Conference on World Wide Web - WWW '16*, 287-297. <https://doi.org/10.1145/2872427.2883041> [Last accessed: January 8, 2021]
- Tang, J., Qu, M., Wang, M., Zhang, M., Yan, J., & Mei, Q. (2015). LINE: Large-scale Information Network Embedding. *Proceedings of the 24th International Conference on World Wide Web - WWW '15*, 1067-1077. <https://doi.org/10.1145/2736277.2741093> [Last accessed: January 8, 2021]
- Tans, S. J., Verschuere, A. R., & Dekker, C. (1998). Room-temperature transistor based on a single carbon nanotube. *Nature*, *393*(6680), 49-52. <https://doi.org/10.1038/29954> [Last accessed: August 2, 2021]
- Times Higher Education (THE). (2016). World University rankings 2015-2016. *THE website*. https://www.timeshighereducation.com/world-university-rankings/2016/world-ranking#!/page/0/length/25/sort_by/rank/sort_order/asc/cols/stats [Last accessed: January 8, 2021]
- Times Higher Education (THE). (2018). World University rankings 2018. *THE website*. https://www.timeshighereducation.com/world-university-rankings/2018/world-ranking#!/page/0/length/25/sort_by/rank/sort_order/asc/cols/stats [Last accessed: January 8, 2021]
- Trapalis, A., Todorova, N., Giannakopoulou, T., Boukos, N., Speliotis, T., Dimotikali, D., & Yu, J. (2016). TiO₂/graphene composite photocatalysts for Nox removal: A comparison of surfactant-stabilized graphene and reduced graphene oxide. *Applied Catalysis B: Environmental*, *180*, 637-647. <https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2015.07.009> [Last accessed: January 8, 2021]
- Tshitoyan, V., Dagdelen, J., Weston, L., Dunn, A., Rong, Z., Kononova, O., & Jain, A. (2019). Unsupervised word embeddings capture latent knowledge from materials science literature. *Nature*, *571*(7763), 95-98. <https://doi.org/10.1038/s41586-019-1335-8> [Last accessed: January 8, 2021]

- Tsumura, A., Koezuka, H., & Ando, T. (1986). Macromolecular electronic device: Field-effect transistor with a polythiophene thin film. *Applied Physics Letters*, *49*(18), 1210-1212. <https://doi.org/10.1063/1.97417> [Last accessed: January 8, 2021]
- Tsumura, A., Koezuka, H., & Ando, T. (1986). Macromolecular electronic device: Field-effect transistor with a polythiophene thin film. *Applied Physics Letters*, *49*(18), 1210-1212. <https://doi.org/10.1063/1.97417> [Last accessed: January 8, 2021]
- Valverde-Rebaza, J. C., & De Andrade Lopes, A. (2012). Link prediction in complex networks based on cluster information. *Advances in Artificial Intelligence - SBIA 2012*, 92-101. https://doi.org/10.1007/978-3-642-34459-6_10 [Last accessed: January 8, 2021]
- Vilatela, J. J., & Eder, D. (2012). Nanocarbon composites and hybrids in sustainability: A review. *ChemSusChem*, *5*(3), 456-478. <https://doi.org/10.1002/cssc.201100536> [Last accessed: January 8, 2021]
- Villas-Boas, A. (2019). Samsung may release a smartphone with new battery technology that can fully charge less than 30 minutes. *Business Insider*. <https://www.businessinsider.com/samsung-graphene-battery-tech-super-fast-charging-2019-8> [Last accessed: January 8, 2021]
- Vipin, A. K., Fugetsu, B., Sakata, I., Isogai, A., Endo, M., Li, M., & Dresselhaus, M. S. (2016). Cellulose nanofiber backboned Prussian blue nanoparticles as powerful adsorbents for the selective elimination of radioactive cesium. *Scientific Reports*, *6*(1). <https://doi.org/10.1038/srep37009> [Last accessed: January 8, 2021]
- Wagner, F. T., & Somorjai, G. A. (1980). Photocatalytic and photoelectrochemical hydrogen production on strontium titanate single crystals. *Journal of the American Chemical Society*, *102*(17), 5494-5502. <https://doi.org/10.1021/ja00537a013> [Last accessed: January 8, 2021]
- Waltman, L., Van Eck, N. J., & Noyons, E. C. (2010). A unified approach to mapping and clustering of bibliometric networks. *Journal of Informetrics*, *4*(4), 629-635. <https://doi.org/10.1016/j.joi.2010.07.002> [Last accessed: January 8, 2021]
- Wang, X., & Lee, P. S. (2015). A polydopamine coated polyaniline single wall carbon nanotube composite material as a stable supercapacitor cathode in an organic electrolyte. *Journal of Materials Research*, *30*(23), 3575-3583. <https://doi.org/10.1557/jmr.2015.342> [Last accessed: January 8, 2021]
- Wang, Y., Fugetsu, B., Wang, Z., Gong, W., Sakata, I., Morimoto, S., Hashimoto, Y., Endo, M., Dresselhaus, M., & Terrones, M. (2017). Nitrogen-doped porous carbon monoliths from

- polyacrylonitrile (PAN) and carbon nanotubes as electrodes for supercapacitors. *Scientific Reports*, 7(1). <https://doi.org/10.1038/srep40259> [Last accessed: January 8, 2021]
- Wang, Z., Li, Y., Liu, J., Gui, T., Ogata, H., Gong, W., Vipin, A. K., Wang, Y., Hong Melvin, G. J., Ortiz-Medina, J., Wang, S., Cruz-Silva, R., Morimoto, S., Hashimoto, Y., Fugetsu, B., Sakata, I., Terrones, M., & Endo, M. (2020). Facile synthesis of graphene sheets intercalated by carbon spheres for high-performance supercapacitor electrodes. *Carbon*, 167, 11-18. <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2020.04.100> [Last accessed: January 8, 2021]
- Watatani, K., Xie, Z., Nakatsuji, N., & Sengoku, S. (2013). Global competencies of regional stem cell research: Bibliometrics for investigating and forecasting research trends. *Regenerative Medicine*, 8(5), 659-668. <https://doi.org/10.2217/rme.13.51> [Last accessed: January 8, 2021]
- Watson, J. D., & Crick, F. H. (1953). Molecular structure of Nucleic Acids. *Nature*, 171, 737-738. <https://www.nature.com/articles/171737a0> [Last accessed: January 8, 2021]
- WIPO. (2020). Patent scope. *WIPO IP PORTAL*. <https://patentscope2.wipo.int/search/en/search.jsf> [Last accessed: January 8, 2021]
- Witten, E., Mathes, V., Sauer, M., & Kühnel, M. (2018). Composites Market Report 2018. https://www.avk-tv.de/files/20181115_avk_ccev_market_report_2018_final.pdf [Last accessed: January 8, 2021]
- Wong, M. H., Giraldo, J. P., Kwak, S., Koman, V. B., Sinclair, R., Lew, T. T., & Strano, M. S. (2016). Nitroaromatic detection and infrared communication from wild-type plants using plant nanobionics. *Nature Materials*, 16(2), 264-272. <https://doi.org/10.1038/nmat4771> [Last accessed: January 8, 2021]
- Wu, Z., Zhou, G., Yin, L., Ren, W., Li, F., & Cheng, H. (2012). Graphene/metal oxide composite electrode materials for energy storage. *Nano Energy*, 1(1), 107-131. <https://doi.org/10.1016/j.nanoen.2011.11.001> [Last accessed: January 8, 2021]
- Xu, H. (2019). R&D crucial to developing new technology. *Global Times*. <https://www.globaltimes.cn/content/1163789.shtml> [Last accessed: January 8, 2021]
- Xu, T. (2017). 43% of Chinese consumers would buy wearable devices for themselves. *Mintel*. <https://www.mintel.com/press-centre/technology-press-centre/43-percent-chinese-consumers-would-buy-wearable-devices> [Last accessed: January 8, 2021]
- Yamano, H., Sasaki, H., & Sakata, I. (2016). Detecting candidate combinations of the keywords organ - material - technology in regenerative medicine. *2016 Portland International Conference on Management of Engineering and Technology (PICMET)*. <https://doi.org/10.1109/picmet.2016.7806750> [Last accessed: January 8, 2021]

- Yang, M., Hou, Y., & Kotov, N. A. (2012). Graphene-based multilayers: Critical evaluation of materials assembly techniques. *Nano Today*, 7(5), 430-447.
<https://doi.org/10.1016/j.nantod.2012.08.006> [Last accessed: January 8, 2021]
- Yerushalmy, J. (1947). Statistical problems in assessing methods of medical diagnosis, with special reference to X-ray techniques. *Public Health Reports (1896-1970)*, 62(40), 1432.
<https://doi.org/10.2307/4586294> [Last accessed: February 8, 2021]
- Young, S. D. (2015). A “big data” approach to HIV epidemiology and prevention. *Preventive Medicine*, 70, 17-18. <https://doi.org/10.1016/j.ypmed.2014.11.002> [Last accessed: January 8, 2021]
- Yu, G., Chen, J., & Zhu, L. (2009). Data mining techniques for materials informatics: Datasets preparing and applications. *2009 Second International Symposium on Knowledge Acquisition and Modeling*. <https://doi.org/10.1109/kam.2009.98> [Last accessed: January 8, 2021]
- Zhang, H., Lv, X., Li, Y., Wang, Y., & Li, J. (2009). P25-graphene composite as a high performance Photocatalyst. *ACS Nano*, 4(1), 380-386. <https://doi.org/10.1021/nn901221k> [Last accessed: January 8, 2021]
- Zhang, Y., Tang, Z., Fu, X., & Xu, Y. (2010). TiO₂-Graphene Nanocomposites for gas-phase photocatalytic degradation of volatile aromatic pollutant: Is TiO₂-Graphene truly different from other TiO₂-Carbon composite materials? *ACS Nano*, 4(12), 7303-7314.
<https://doi.org/10.1021/nn1024219> [Last accessed: January 8, 2021]
- Zhao, J., Xie, Y., Yu, C., Le, Z., Zhong, R., Qin, Y., & Liu, F. (2013). Preparation and characterization of the graphene-carbon nanotube/CoFe₂O₄/polyaniline composite with reticular branch structures. *Materials Chemistry and Physics*, 142(1), 395-402.
<https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2013.07.035> [Last accessed: January 8, 2021]
- Zhao, Z. (2018). China No 1 in world patent applications for graphene tech. *China Daily*.
https://www.chinadaily.com.cn/cndy/2018-02/01/content_35623375.htm [Last accessed: January 8, 2021]
- Zhou, T., Lü, L., & Zhang, Y. (2009). Predicting missing links via local information. *The European Physical Journal B*, 71(4), 623-630. <https://doi.org/10.1140/epjb/e2009-00335-8> [Last accessed: January 8, 2021]
- 赤松幹之. (2008). 学術雑誌はいかにして始まったのか. *情報管理*. 51(8). 617-619.
https://www.jstage.jst.go.jp/article/johokanri/51/8/51_8_617/_pdf [Last accessed: January 8, 2021]

- 足立 伸一. (2013). 時間分解 X 線構造解析法による光エネルギー変換機構の解析技術 (特集 創エネ, 省エネ, 蓄エネマテリアルとしての「人工光合成」とその可能性). *Material stage*, 13(5), 24-27.
- 荒磯 恒久. (2014). 欧米における産学連携と日本の特徴. *産学連携学*, 10(1), 1-12.
https://www.jstage.jst.go.jp/article/jjsip/10/1/10_1_1/_pdf [Last accessed: January 8, 2021]
- 池田 祐子, 奥山 倫弘, 中澤 幸仁, & 押山 智寛. (2019). マテリアルズ・インフォマティクスを用いた高分子複合材料の弾性率の予測モデル構築. *KONICA MINOLTA TECHNOLOGY REPORT*, 16, 136-141.
https://www.konicaminolta.jp/about/research/technology_report/2019/pdf/16_ikeda.pdf [Last accessed: July 18, 2021]
- 科学技術振興機構 中国総合研究・さくらサイエンスセンター. 中国の主要 800 大学. *Science Portal China*. https://spc.jst.go.jp/education/univ/univ_000.html [Last accessed: January 8, 2021]
- 鹿島 久嗣. (2012). ネットワーク構造予測. *人工知能学術誌*. 22(3). 344.
https://hkishima.github.io/publication/JSAL_network_review.pdf [Last accessed: January 8, 2021]
- 加藤 幸一郎, & 谷村 直樹. (2018). 材料開発の新潮流 ～マテリアルズインフォマティクス～. *みずほ情報総研*. https://www.mizuho-ir.co.jp/publication/giho/pdf/009_11.pdf [Last accessed: January 8, 2021]
- 株式会社日本能率協会総合研究所(JMAR). (2019). 人工肉世界市場 2023 年に 1500 億円規模に. *PR Times*. <https://prtimes.jp/main/html/rd/p/000000009.000035568.html> [Last accessed: January 8, 2021]
- 荻谷 剛彦. (2007). 教育の社会科学研究の<失敗>(II 教育行政学への問いかけ). *日本教育行政学会年報*, 33, 100-110. https://doi.org/10.24491/jeas.33.0_100 [Last accessed: May 20, 2021]
- 環境省. (2007). IPCC 第 4 次評価報告書 統合報告書 概要 (公式版). *環境省 web サイト*.
<https://www.env.go.jp/earth/ipcc/4th/ar4syrr.pdf> [Last accessed: January 8, 2021]
- 木村英紀. (2004). 学術の細分化と統合. *学術の動向*. 2004. 4, 64-66.
https://www.jstage.jst.go.jp/article/tits1996/9/4/9_4_64/_pdf [Last accessed: January 8, 2021]
- 経済産業省. (2006). 新経済成長戦略. *経済産業調査会*.
- 経済産業省. (2016). イノベーションについて ～エネルギー・環境イノベーション戦略の検討状況の紹介～ 長期地球温暖化対策プラットフォーム第 2 回資料. *経済産業省 web サイト*.
https://www.meti.go.jp/committee/kenkyukai/energy_environment/ondanka_platform/pdf/002_05_00.pdf [Last accessed: January 8, 2021]
- 国立研究開発法人科学技術振興機構 研究開発戦略センター(JST). (2017). 俯瞰ワークショップ報告書 平成 27 年度エネルギー科学技術分野 最新研究開発動向. *JSTweb サイト*.

- <https://www.jst.go.jp/crds/pdf/2015/WR/CRDS-FY2015-WR-07.pdf> [Last accessed: January 8, 2021]
- 国立研究開発法人科学技術振興機構 研究開発戦略センター(JST). (2019). 研究開発の俯瞰報告書 ナノテクノロジー・材料分野 (2019年). *JSTweb* サイト.
- https://www.jst.go.jp/crds/pdf/2018/FR/CRDS-FY2018-FR-03/CRDS-FY2018-FR-03_05.pdf
[Last accessed: January 8, 2021]
- 国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構(NEDO). (2018). 「低炭素社会を実現するナノ炭素材料実用化プロジェクト (研究開発項目①-4~11、②-1-2、②-2、②-3-4~5)」事後評価報告書 (案) 概要. *NEDOweb* サイト. <https://www.nedo.go.jp/content/100876079.pdf> [Last accessed: January 8, 2021]
- 田島 大輔. (2014). メンポーラスな導電助剤による電気二重層キャパシタの性能向上 (特集 創エネ,省エネ,蓄エネマテリアルとしての「電気二重層キャパシタ」および「リチウムイオンキャパシタ」を支えるマテリアル,向上するマテリアル). *Material stage*, 13(11), 35-37.
- 内閣府. (2016). エネルギー・環境イノベーション戦略 - 科学技術政策 - 内閣府. *内閣府 web* サイト.
<https://www8.cao.go.jp/cstp/nesti/index.html> [Last accessed: January 8, 2021]
- 内閣府. (2018). Society 5.0 とは. *内閣府 web* サイト. https://www8.cao.go.jp/cstp/society5_0/ [Last accessed: January 8, 2021]
- 内閣府. (2018). 未来投資戦略 2018—「Society 5.0」 「データ駆動型社会」 への変革—基本的視座と重点施策. *内閣府 web* サイト. https://www5.cao.go.jp/keizai-shimon/kaigi/minutes/2018/0615/shiryo_03-2.pdf [Last accessed: January 8, 2021]
- 日本ゼオン株式会社, 国立研究開発法人産業技術総合研究所. (2016). 驚異の新素材、単層カーボンナノチューブ 世界初の量産工場が稼働. *NEDO 実用化ドキュメント*.
<https://www.nedo.go.jp/hyoukabu/articles/201602cnt/index.html> [Last accessed: January 8, 2021]
- 日本学術振興会(JSPS). (2017). 【ニュース・中国】 全国の大学の年間収入総額は 9,364 億円. *海外学術動向*ポータルサイト. <https://bit.ly/3i1JSvL> [Last accessed: January 8, 2021]
- 日本経済新聞. (2019). 雁行型から並走型へ 国を越え「知」を持ち合う アジアを超える 多様性を生かす(1). *日本経済新聞*. 2019年6月12日. <https://s.nikkei.com/399vtcD> [Last accessed: January 8, 2021]
- 服部毅. (2019). Imec、半導体微細化ロードマップを 1nm へ向けて更新 - ITF Japan 2019. *マイナビニュース*. <https://news.mynavi.jp/article/20191119-925443/> [Last accessed: January 8, 2021]

毎日新聞. (2016). i P S細胞 : 夢を蓄積 i P S 細胞作製、論文発表10年. *毎日新聞*. 2016年8月25日. 朝刊. <https://mainichi.jp/articles/20160825/ddm/010/040/005000c> [Last accessed: January 8, 2021]

文部科学省. (2019). 科学技術白書: 我が国の研究力向上を目指して. *日経印刷*.

文部科学省. (2019). 科学技術・学術審議会 学術分科会 研究環境基盤部会(第102回) 参考データ集. 文部科学省 web サイト. https://www.mext.go.jp/content/1417785_012.pdf [Last accessed: January 8, 2021]

研究業績

1) 査読付き論文

Wang, Y., Fugetsu, B., Sakata, I., Fujisue, C., Kabayama, S., Tahara, N., & Morisawa, S. (2020). Monolayered platinum nanoparticles as efficient Electrocatalysts for the mass production of electrolyzed hydrogen water. *Scientific Reports*, *10*(1). <https://doi.org/10.1038/s41598-020-67107-1>

2) 査読付き国際会議

Fujisue, C., & Sakata, I. (2017). Detection of emerging technologies for Field effect transistors: A citation-based analysis. *2017 Portland International Conference on Management of Engineering and Technology (PICMET)*. <https://doi.org/10.23919/picmet.2017.8125280>

Fujisue, C., Sasaki, H., Yamano, H., & Sakata, I. (2018). Co-word analysis to detect possible combinations for composite materials. *2018 Portland International Conference on Management of Engineering and Technology (PICMET)*. <https://doi.org/10.23919/picmet.2018.8481973>

3) 国内会議

藤末 智夏, 坂田 一郎, 論文情報の分析による電界効果トランジスタ分野の分析, 研究イノベーション学会, 2016年11月6日(発表形式)口頭(2H02)C

謝辞

謝辞を述べるにあたってまず、指導教員の坂田一郎教授に心より感謝申し上げます。東京工業大学在籍時に修了後の進路選択で迷走していた私を研究室に受け入れてくださったご恩は決して忘れません。博士課程入学後も至らない点が多々ありご迷惑をおかけしましたが、先生の親切なご指導のおかげで本論文を無事に完成させることができました。今後は本論文を作成する上で得た知識や経験を活かして、先生のように困っている人に手を差し伸べられるような研究者を目指していきたいです。

副査の古田一雄教授、茂木源人教授、田中謙司准教授、古月文志特任教授には予備審査で有益なご指摘をいただきました。特に古月特任教授には、本論文の執筆にあたり材料の専門家としてインタビューにご協力いただきました。いただいたご意見を基に本論文をより完成度が高いものに仕上げることができました。この場を借りてお礼申し上げます。

浅谷公威特任助教にはデータ分析の手法や参考文献などテクニカルな部分においてご指導いただきました。秘書の佐藤妙子氏と石原絢氏には主に事務手続きにおいてサポートいただきました。在学時から今回の博士論文の執筆において長い間お世話になりました。感謝申し上げます。

本論文の内容に直接は関係ありませんが、博士課程在籍中は株式会社日本トリムのご協力のもと水科学の研究に携わる機会を与えていただきました。お礼申し上げます。また、水科学の研究に携わっている当時に親しくさせていただいた真鍋翔一氏、熊代嗣生氏、故菅原真樹氏にも感謝いたします。

勤務先には本論文の執筆において深い理解と支援をいただきました。感謝申し上げます。特に予備審査の直前に毎週有給休暇を取得した際にはご迷惑をおかけしましたが、おかげさまで本論文を完成させることができました。弊社の自由に働ける環境と従業員を尊重する文化のもと、業務と本論文の執筆を両立することができました。

家族には論文の執筆を長い間見守っていただきました。両親には、博士課程進学というとても貴重なチャンスを与えていただきました。博士課程で得た知恵と経験は今後の人生において大きな財産になることを確信しています。夫には論文執筆を優先させることも多々あり、新婚の時期にもかかわらず寂しい思いをさせてしまいました。それにも関わらず、私が落ち込んでいた時にはいつも励ま

しの言葉をかけてくれました。家族への感謝の意を表して謝辞を終えようと思います。