# 文部科学省マテリアル先端リサーチインフラ 第2回データ連携基盤委員会/第1回データ構造化委員会 合同委員会 議事要旨

開催日時:2021年6月22日13:00~14:30

開催方法:オンライン会議

出席者:(敬称略)

運営機構

小出 康夫 (機構長)

# データ連携基盤委員/データ構造化委員

吉川 英樹 (NIMS)、松波 成行 (NIMS)、戸津 健太郎 (東北大学)、

田浦 健次朗 (東京大学)、加藤 剛志 (名古屋大学)、小寺 秀俊 (京都大学)、

加藤 幸一郎 (九州大学)、石川 亮 (東京大学)、湯川 博 (名古屋大学)、

土屋 智由(京都大学)、村上 恭和(九州大学)、藤ヶ谷 剛彦(九州大学)

#### 陪席:

文科省 曽根 純一PD、伊藤 聡サブPD、永野 智己PO 小川 浩司参事官付参事官補佐、その他複数名

ハブ機関

今野 豊彦(東北大学)

センターハブ機関

三留 正則 (NIMS)、内堀 千尋 (NIMS)

### 配布資料:

【議事次第】文部科学省マテリアル先端リサーチインフラ運営機構 第2回データ連携基盤委員会 /第1回データ構造化委員会 合同委員会

【資料 1】データ連携基盤委員・データ構造化委員・データ構造化 WG 担当者名簿

【資料 2】接続装置アンケート結果と解析・選定について

【資料3】NIMS装置コードとサンプルデータについて

【資料4】ネットワークの設定について(案)

【資料 5】ネットワーク説明会開催のご紹介(情報共有)

【資料 6】微細加工系データ収集検討 WG について(案)

## 議事:

(1) 新委員および委員長について

運営機構長から資料 1 に沿って、データ連携基盤委員、データ構造化委員とデータ構造化 WG のメンバーに松波 成行 MaDIS 参事役を加えること、吉川 英樹 材料データプラットフォームセンター・副センター長と松波 成行 MaDIS 参事役をそれぞれデータ連携基盤委員会とデータ構造化委員会の委員長並びに副委員長とすることが提案され、認められた。これに伴い、以降の議事は吉川新委員長により進められた。

- (2) 接続装置アンケート結果と解析・選定について
- (3) NIMS 装置コードとサンプルデータについて

松波副委員長から、資料 2 に沿って接続装置アンケート結果と解析・選定について、資料 3 に沿って NIMS 装置コードとサンプルデータについて説明が行われた。吉川委員長より補足コメントは下記の通り。

今回の説明は装置にオリエンテッドな話となっている。データ構造化は材料研究にも深くかかわることなのでメタ情報は重要であるが、今回は触れていない。生データの取り扱いに関するメーカーの同意が最初の大きな関門になりかねない。NIMS から外部に生データを公開しようとしたところ、フォーマットや語彙の使い方に著作権が発生するため、外に出さないでほしいと申し出た企業があった。選定した 18 機種であっても生データレベルで外に出せるのは多くない。この事業では生データを扱い共用までもっていくことが目標とされるので装置メーカーの同意が必要。このような事情で装置オリエンテッドな話となった。また、データ構造化の作業を放射光施設という施設でくくるか、放射光施設の中にある装置でくくるか、議論が必要であると認識している。

主な議論は以下の通りであった。(敬称略)

(村上)

機関毎の機種見込み数を示したページに記載の数字の意味について確認したい。158 台 12 種目が配分されていると思うが、今年度中に 1 機関あたり 2 台程度構造化を進めるということとの関係は何か。

(松波)

アンケートを集計したところ、ある機種をたたき台として全機関が保有する機器で進めるのが 良いと考えた。158台はボリューム効果が高いと考えられる機種であり、各機関にまんべんなく 割り振ったものである。

(村上)

方針の変更があったと理解。勉強会を設定して進める場合に、WG のメンバーから 12 グループ 個別に設定するのか。

(松波)

12 機種毎にその機器を持っている機関があつまって、構造化の取り組みやテンプレートの作り方を体感、実践するところから始めるのが効果的と考える。ハブ機関が持っていない装置であってもスポーク機関が持っていれば勉強会に出ることを想定しており、158 台がカバーできると考える。

(村上)

機関によっては負担が大きくなる場合がある。勉強会においてもけん引役を設けるなどリーダーシップによる進め方に検討をお願いしたい。

(松波)

NIMS がけん引役となることを想定。12 種目をパラレルに走らせるのではなく、分割して平準化して取り組むことで負担が重くならないよう進めるよう計画している。

(吉川)

12 機種は段階的に装置メーカーに対して、生データをプロジェクトでシェアし、中身を読むことも含めて交渉を始めようとしている。波及効果を考えて台数の多い装置から取り組みたい。

(土屋)

XRD、単結晶 X 線構造解析と X 線回折、また顕微鏡もいくつか分けているのはそれぞれどのような意味か。

(三留)

イエローページの中分類で分け始めたけれど不具合があるのは認識。ただし、見直しても順番は変わらないためそのまま資料とした。似たような装置で同じメーカーの場合は応用できるので同じ WG で活動するのではないかと想定。

(土屋)

リスト上位には解析系の装置が多い。微細加工や物質合成の観点からの議論は必要ないか。

(三留)

加工に関しては中分類がうまく合わなかったため、中分類を見直して分類を分けたりした。下位にあるものは単に順番が遅くなるだけで、取り組むことには変わりない。まずは、数が多く波及効果の高いものから取り組む。

(戸津)

加工関係の装置は多くないが10台近いものもある。最初からある程度入れたほうが準備や今後の取り組みに都合がよいのではないか。

(吉川)

是非入れるべきという装置があれば指摘いただきたい。

(戸津)

メーカーの同意が取れるかどうかはクリティカル。メーカーの同意が取れない場合はどうするのか。

(吉川)

メーカーとのやり取りの中で、ゼロ(全く同意が得られない)・イチ(完全に同意が得られる) ではなく、部分的にでも同意が取れるところを交渉していく。

# (4) ネットワークの設定について

資料4に沿って、松波 副委員長より全ハブで共通するネットワーク関連の対応すべき事柄について情報共有と対応の共通化を図るための説明が行われた。

吉川委員長からの補足コメントは以下の通りであった。

NIMS 内でも古い OS のデバイスからのデータの転送を IoT セキュリティデバイスを介することで安全とすることに関して IT セクションの同意が得られるために数年の交渉が必要であった。この点について各機関の IT セクションの同意をできるだけ早く取りたいと考える。

主な議論は以下の通りであった。

(土屋)

当初は IoT セキュリティデバイスを使えば古い OS デバイスでも大丈夫という説明だったと思うが。

(吉川)

NIMS 外の機関での検討結果、そうではないということに変更した。

(土屋)

そもそも Windows8 や 10 を使っている装置はほとんどないのでは。Windows10 も 2025 年にサポートが終わると聞いている。それでも推奨される方法でないとだめなのか。Windows10 の 装置を使っていてもサポートが終われば切り替えなければならないのか。

(吉川)

(古い OS のデバイスでも IoT セキュリティデバイスを介せば安全にデータ転送ができるとする) 当初の方針で進められるに越したことはないが、各機関の IT セクションの同意を得る必要がある。

(松波)

NIMSでもサポートの切れたOSを使うことをITセクションが認めるまで数年かかった。この議論がされていない機関ではさらに時間がかかる。ITセクションのOKがでればそれでよい。

#### (加藤 (幸))

古い機器の場合はハブごとのサーバーにデータを集めてから NIMS のサーバーに送るという説明であったが、その場合でも IoT デバイスを間に挟む必要はあるか。

(吉川)

データがバイナリでなければそのまま上げてよいが、バイナリの場合についてはまだ不明。

(加藤 (幸))

データの構造化とスクリプトができた場合に必要なデータが決まれば容量が予測できるのでは。 さらにデータ構造化をするためにメーカーの協力範囲がわからないと、どのように構造化をす るのかが明らかにならないのでは。

(吉川)

クリティカルになる点をまずクリアにするため、どの装置メーカーからスタートするか、セキュリティ面で参画機関とどう合意するかを今回議題にしており、それが済めば各 WG で具体的な話ができると考えている。

(戸津)

IoT デバイスがレガシーのシステムでも使えるのは魅力的。NIMS で実績があるのは他の機関にとってもプラスになると考える。

(吉川)

NIMS に所属しているスポーク機関に向け IoT デバイスの説明会を予定している。ハブ機関の

関係者の参加も歓迎する。

(加藤(剛))

中継 PC を使って接続する場合、NIMS のサーバーに直接中継 PC からデータが送られるのか。 (吉川)

クラウド上に各ハブが管理するエリアを設けて、そこに転送するイメージ。

(加藤)

ユーザによって一部出したくないデータがある場合、交通整理はどこがするのか。

(吉川)

構造化にかかわるところなので、各ハブ機関でポリシーを決めてもらえばよい。

(加藤)

公開可能データがクラウドに行き、そうでないデータが機関内のサーバーに行くのか、あるいはすべてのデータを機関内のサーバーに貯めて、公開可能なデータのみクラウドに行くのか。

(吉川)

クラウド上に各ハブが管理するエリアを設けるが、そこにどう転送するかは各ハブのポリシー。 クラウド上のエリアに転送されたデータをどのように公開するかは別のポリシーを決めなけれ ばならない。これは今後の議題として認識している。

(田浦)

ハブ機関で一旦データは蓄積するのか。

(吉川)

すぐにクラウドは立ち上がらないので、まずはハブ機関で蓄積。クラウドが立ち上がった後は 各ハブが管理するゾーンに蓄積。そこにどのデータを転送するのか、非公開データも転送する のか、といった判断をどうするかという点は今後の議題と認識している。

(5) IoT ネットワークの説明会開催のご紹介(情報共有)

資料 5 に沿って、NIMS 直下のスポーク 7 機関に向けて開催するセキュリティデバイスおよび 管理システムの概要説明会について説明が行われた。

(6) 微細加工系データ収集検討 WG について(案)

資料6に沿って、微細加工領域のデータ収集のあり方を検討するWGを発足させて検討を進めること、メンバーは横断技術連携領域の小寺秀俊責任者を含むハブ機関を中心に選任することが提案され、承認された。

小寺秀俊責任者からのコメントは以下の通りであった。

データを吸い上げる構造を作るためにも一つのハブで悩むより、同じ共通領域でサンプルをつくることで問題がクリアになる。そのため横断領域で議論したい。

### (7) その他

(吉川)

データの登録等は重要な議題と認識している。装置メーカーの協力や情報セキュリティシステ

ムがクリティカルなので今日の議題とした。引き続き議論を進めるにあたり、個別の議論を各 機関と進めることも検討する。

(??)

13ページの図で、各機関の数字で、例えば東大が4となっているが、4つの機種は後ろのページにリストアップされているのか。

(松波)

各機関別のリストを別途用意する。

(戸津)

IoT デバイスの説明会は NIMS 以外のハブの下にあるスポークに声をかけてもよいのか。 (松波)

NIMS 以外のハブ直下のスポークも参加を歓迎する。

#### (加藤 (幸))

前回の委員会では NIMS でデータ構造化システムができていて、生データをそのシステムに渡すことで構造化されると聞いたが、今回はハブでデータを構造化したものをクラウドに転送するという説明と感じた。現状はどうなっているか。

(吉川)

データの構造化をクラウド上でできるシステムを構築しようとしている。クラウドが立ち上がった後も、各ハブでの取り組みの希望もあると聞いているので、今後の議題としたい。

(土屋)

今回の議論はスポーク機関にどのように展開すればよいのか。

(小出)

議事要旨も含めて議事録を流すので、このような議論があったという点はハブから展開していただければよい。修正点は NIMS から改めて展開する。

(土屋)

ネットワークに関する問題点など各スポークの問題はどのように対応すればよいか。

(出出)

今後 NIMS センターハブ/運営機構がまずハブと個別に訪問して具体的に議論したいと考えている。

以上

(議事録作成:内堀)