

# 2023年度 TIA 連携プログラム探索推進事業「かけはし」

## 調査研究報告書(公開版)

【研究題目】放射光研究 DX 化のための多機関連携 XAFS データベース拡張技術調査研究

【整理番号】TK23-047

【代表機関】NIMS

【調査研究代表者（氏名）】

石井真史

【TIA 内連携機関：連携機関代表者】

KEK：木村正雄

【TIA 外連携機関】

北海道大学 触媒科学研究所

立命館大学生命科学部

高輝度光科学研究センター 情報技術推進室

名古屋大学シンクロトロン光研究センター

あいちシンクロトロン光センター

九州シンクロトロン光研究センター

【報告書作成者】

石井真史

【報告書作成年月日】

2024年3月21日

【連携推進（具体的な連携推進活動内容とその活動の効果等）】

(1) MDR XAFS データベースのデータ拡充

今回、新たに二つの機関（あいちシンクロトロン光センター 九州シンクロトロン光研究センター）がプロジェクトに加わり、MDR XAFS DB

(<https://doi.org/10.48505/nims.1447>) を拡充した。これにより、全スペクトルデータ数は2263に達した。

(2) ワークショップの開催

2023年10月18日（水）に東京・一橋講堂・中会議場4（現地・ハイブリッド）にてワークショップ「XAFS 統合データベースの第二步」を開催した。参加者は75名

（接続数からの推計 登録者数96名）であった。プログラムは以下のとおりである  
プログラム（敬称略）：

第一部（座長 石井真史）

13:30-13:40 「XAFS 統合データベースの第二步」趣旨説明（NIMS 石井真史）

13:40-14:05 SPring-8 データセンター構想のご紹介（理研 初井宇記）

14:05-14:30 放射光研究のデータベースの国際連携に向けて（UVSOR 松井文彦）

14:30-14:55 企業からのMDR XAFS DBへの期待（日本製鉄 原野貴幸）

14:55-15:10 休憩

第二部 (座長 木村正雄)

15:10-15:35 施設間共通メタデータの狙いと今後—国際標準をめざして (北大 朝倉清高 名大 田淵雅夫)

15:35-16:00 「非」標準試料のデータ登録と利用：高圧 XAFS からの期待 (広大 石松直樹)

16:00-16:20 総合討論 「より多くのデータ deposit のための環境整備」

16:20-16:30 総括 (KEK 木村正雄)

ここでは、国内・国際的なデータ統合、メタデータのフォーマット、様々なデータの登録方法、データの権利関係の活発な議論がなされた。

(3) データベースに関する連続講演会

2023 年 9 月 5 日 (火) XAFS 討論会にて、連続講演会を開き、集中的にデータベースに関する議論を行った。プログラムは以下のとおりである

【一般発表】 10:45~11:15

「統合型 XAFS データベースプレヒストリ」

○朝倉清高 1, 石井真史 2, 松本崇博 3, 田淵雅夫 4, 小林英一 5, 稲田康宏 6, 木村正雄 7,8 (1 北大触媒研, 2 NIMS, 3 JASRI, 4 名大, 5 SAGA-LS, 6 立命館大, 7 高エネ機構, 8 総研大)

「XAFS データベースの環境整備」

○木村正雄 1,2, 石井真史 3, 松本崇博 4, 田淵雅夫 5, 小林英一 6, 稲田康宏 7, 朝倉清高 8 (1 高エネ機構, 2 総研大, 3 NIMS, 4 JASRI, 5 名大, 6 SAGA-LS, 7 立命館大, 8 北大)

「SPRING-8 での XAFS データに関する活動」

○松本崇博 1, 大淵 博宣 1, 本間 徹生 1, 片山 真祥 1 (1 高輝度光科学研究センター)

【依頼講演】 11:15~11:45

「MDR XAFS DB:施設を超えた横断検索はいかにしてできたか」

○石井真史 (物質・材料研究機構)

【質疑】 11:45~12:10

ここでは、データの登録方法から、クオリティまで幅広い議論がなされ、今後の取り組み継続の重要性が示された。

(4) 定例会合の開催

①XAFS 討論会にあわせ、2023 年 9 月 4 日 (月) に立命館大学にて定例会合を開催した。内容は以下のとおりである。

\* Q2XAFS の報告

\* 2024 年の XAFS DB 国際会議に向けた検討

\* 共通メタデータの活用

\* データの追加登録について

\* RDUF 研究資料・実験機器への PID 付与検討小委員会の活動紹介

\* 海外からのデータ登録の動き、講習会などでのプロモーション活動の報告

②日本放射光学会年会に合わせ、2024 年 1 月 11 日 (木) アクリエひめじにて定例会合を開催した。内容は以下のとおりである。

\* XAFS データベース会合 趣旨説明 (現状とこれから)

\* 新規参画機関 アクチノイド系 XAFS データ登録に向けて

\* 新規参画機関 有機低分子系 XAFS データ登録に向けて

\* メタデータ国際標準化の動き

\* RDUF 報告 利用ライセンスの検討

- \* データライセンスについてコメント
- \* MDR XAFS DB の近況報告 メタデータエディタ・NII 共研など

#### 【調査研究内容（研究背景・課題解決の内容と結果）】

##### (1) 研究の背景と目的

計測法のハイスループット・高度化（例えば多次元イメージデータ）やデータ駆動による材料開発が進む中で、データ流通による研究の活性化のための基盤整備作成の要求が高まっている。昨年度にかけはしで技術調査し、その結果を反映したデータベース（MDR XAFS DB, <https://mdr.nims.go.jp/collections/qz20st57x>）について、データ登録機関の拡大と、ユーザーからの直接登録、ここで使われる共通メタデータ維持拡張に必要な要件に関する技術調査を行う。これによりデータ循環のためのインフラ利活用の指針を得る。

##### (2) 課題解決の内容と結果

調査では、①連携機関の拡大、②ユーザーによるデータの直接登録、③共通メタデータ形式の普及に関する要件を実施・検討した。①では、現在までにデータ登録した4機関に加え、新たに参画するあいちシンクロトロン光センター、九州シンクロトロン光研究センターのデータを登録した。②と③では、多様な実験を実施しているユーザーデータを共通化し、大量のデータをMDR XAFS DBに直接登録する上で必要な調査を実施した。特に、メタデータの登録に必要なエディタの試作版を作成して、検証利用を実施した。階層構造をもつメタデータ入力に関して実用的な実装方法が提示できた反面、リングの情報やビームラインの条件、光学素子や計測機器の情報など、施設から出てくるメタデータの収集と統合に課題が残った。調査段階で、産業利用と学術利用のデータライセンスに対する考え方の違いが明確になり、この解決が急務であることがわかった。同様な課題は、多くのリポジトリで抱えており、より広い連携と共同作業の中で統一的な解が得られる可能性がある。

##### (3) このほか、下記の XAFS 研修会・講習会で、データベースの利用説明を実施した 2024

2/9 SPring-8 研修会「初中級者を対象とした XAFS 測定研修会」（第六回）

2023

12/8 SPring-8 研修会「初中級者を対象とした XAFS 測定研修会」（第五回）

11/27 あいち SR EXAFS 解析講習会

11/15 SPring-8 研修会「軟 X 線吸収分光測定研修会」

11/1 SPring-8 研修会「初中級者を対象とした XAFS 測定研修会」（第四回）

7/28 SPring-8 研修会「初中級者を対象とした XAFS 測定研修会」（第三回）

##### (4) 代表的な発表は以下のとおりである：

① Masashi Ishii, Kosuke Tanabe, Asahiko Matsuda, Hironori Ofuchi, Takahiro Matsumoto, Toyonari Yaji, Yasuhiro Inada, Hiroaki Nitani, Masao Kimura & Kiyotaka Asakura

Integration of X-ray absorption fine structure databases for data-driven materials science

Science and Technology of Advanced Materials: Methods, 2023, 3:1, 2197518, <https://doi.org/10.1080/27660400.2023.2197518>

② Masashi Ishii, Takahiro Matsumoto, Yasuhiro Inada, Masao Kimura, Masao Tabuchi, Eiichi Kobayashi, Kiyotaka Asakura

Integration of XAFS databases to accelerate data-driven materials research  
MRM2023, organized by Materials Research Society of Japan (MRS-J)  
2023/12/11-16, Japan, Kyoto, Kyoto International Conference Center

③ 石井真史

NIMS 材料データベースの「I」-オントロジーベースのリポジトリ・データベース連携 (招待講演)

2023/6/19-23, JAPAN OPEN SCIENCE SUMMIT 2023, 国立情報学研究所  
日本 オンライン開催

④ A. Matsuda, K. Tanabe, M. Ishii, T. Kadohira

Materials Data Repository metadata schema and cross-database federation  
FEMS EUROMAT 2023  
2023/9/7 Germany

【今後の活動予定】

(1) データ拡大に関する取り組み

日本原子力研究所および、兵庫県立大学との連携が確定しており、新たにアクチノイド系、有機低分子系のシステムティックにまとまったデータを MDR XAFS DB に登録する。

(2) データ利用ライセンスに関する取り組み

2024 年度 国立情報学研究所公募型共同研究「競合分析を使った 産学界共有可能な放射光データ基盤の制度設計」が採択されており、この枠組みの中で、今回課題として浮上した、データ利用ライセンスに関する課題を解決し、規約を作成する。

(3) 国際的な連携に関する取り組み

国際的に XAFS データベースの連携やデータフォーマットの統一に向けた動きが盛んになっており、日本としてのプレゼンスは出しつつ、協調してデータのビジビリティや利用性を高める活動を実施する

【SDGs17 目標について、調査研究成果について、貢献ができると思われる項目があれば、最大3つまで☑をご記載下さい。】

研究成果に関連する SDGs 目標がある。

関連する SDGs 目標は無い

1 <input type="checkbox"/> 貧困をなくそう	2 <input type="checkbox"/> 飢餓をゼロに
3 <input type="checkbox"/> すべての人に健康と福祉	4 <input type="checkbox"/> 質の高い教育をみんなに
5 <input type="checkbox"/> ジェンダー平等を実現しよう	6 <input type="checkbox"/> 安全な水とトイレを世界中に
7 <input type="checkbox"/> エネルギーをみんなに、そしてクリーンに	8 <input type="checkbox"/> 働きがいも経済成長も
9 <input checked="" type="checkbox"/> 産業と技術革新の基盤を作ろう	10 <input type="checkbox"/> 人や国の不平等をなくそう
11 <input type="checkbox"/> 住み続けられるまちづくりを	12 <input type="checkbox"/> つくる責任、つかう責任
13 <input type="checkbox"/> 気候変動に具体的な対策を	14 <input type="checkbox"/> 海の豊かさを守ろう
15 <input type="checkbox"/> 陸の豊かさを守ろう	16 <input type="checkbox"/> 平和と公正をすべての人に
17 <input type="checkbox"/> パートナリシップで目標を達成しよう	

以上