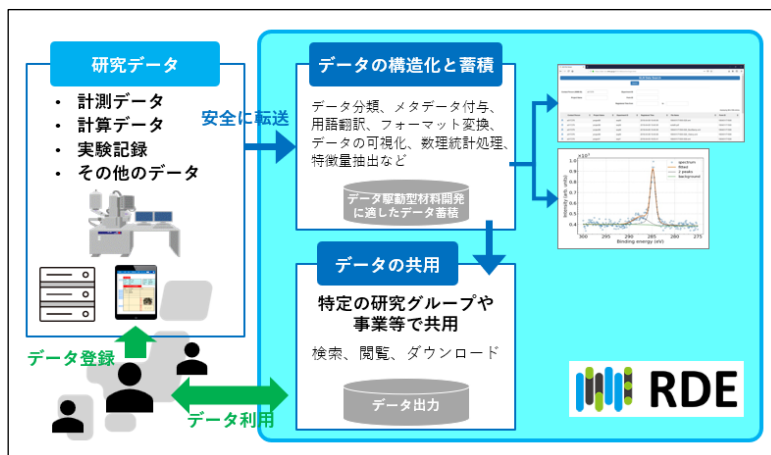


材料データプラットフォーム「DICE」のデータ収集・蓄積機能を大幅強化
～クラウド化等によりマテリアルデータの戦略的な収集・蓄積・流通・利活用を推進～

配布日時：2023年1月17日14時
国立研究開発法人物質・材料研究機構

概要

1. 国立研究開発法人物質・材料研究機構（NIMS）は、データ中核拠点として整備を進める材料データプラットフォーム「DICE」^{※1}について、システム基盤をパブリッククラウドに移設し、研究データを自動的に構造化して蓄積するシステム（RDE）を追加することで、全国のユーザーのデータを収集・蓄積する機能を大幅に強化しました。また、DICE 内で運用している物質・材料データベース「MatNavi」を改良して、ユーザーの利便性を大きく向上させました。今後も、DICE のサービスを継続的に展開・拡充し、全国規模で展開するデータ駆動型のマテリアル研究を強力に後押しします。
2. NIMS は、文部科学省「マテリアル DX プラットフォーム構想」の中で「データ中核拠点」として、産学の高品質なマテリアルデータの戦略的な収集・蓄積・流通・利活用を進めています。その基盤となるのが、材料プラットフォーム「DICE」です。マテリアルデータの入口（つくる）から、蓄積（ためる）、そして、出口（つかう）までを一貫して扱うシステムの構築を目指して、これまで物質・材料データベース（MatNavi）や材料に関する論文とデータのリポジトリ（MDR）などを公開・運用してきました。
3. この度、DICE にデータ蓄積・共用サービス（RDE）が加わります。RDE は、日々実験室で生まれる研究データをオンラインで迅速に登録するために NIMS が開発したシステムです。登録されたデータは、自動的に再利用可能な形に構造化するための各種処理が施され、データ駆動型のマテリアル研究に適した形で蓄積されます。蓄積されたデータは、ユーザーや研究グループ専用の領域で使用できることに加え、他の研究グループや他機関のプロジェクトメンバーと共用することができ、マテリアル研究開発の DX 化を支援します。さらに、広域での共用化も可能であり、我が国のマテリアル研究に貢献できるシェアードデータ^{※2}領域を形成していくことが期待されます。



4. 今後、マテリアル先端リサーチインフラ事業（ARIM）やデータ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト事業（DxMT）と連携して「マテリアル DX プラットフォーム」構築を実現します。

※1 材料データプラットフォーム「DICE」：<https://dice.nims.go.jp/>

※2 クローズドデータのうち、個別単位を超えた複数の単位で戦略的に共用すべきデータ（限定共有情報）

DICEは、マテリアルデータの入口（つくる）から、蓄積（ためる）、そして、出口（つかう）までを一貫して扱うシステムです。実験・計測・計算、文献、機関リポジトリなど複数の情報源からデータを収集し、再利用がしやすいように構造化して蓄積します。データの公開範囲を管理できる仕組みとなっており、これによってデータを適切に流通させることができるようになり、再利用が促進されます。

これまでに、NIMS 物質・材料データベース (MatNavi)、Materials Data Repository (MDR)、などをご利用いただけてきましたが、これら（の一部）がパブリッククラウド上で提供されることとなります。加えて、新たに、データ蓄積・共用サービス (RDE) が提供されることとなります。DICE トップページを図1に示します。



図1 DICE トップページ

新サービス：RDE（データ蓄積・共用サービス）

NIMSは、文部科学省「マテリアルDXプラットフォーム構想」において、「データ中核拠点」として産学の高品質なマテリアルデータの戦略的な収集・蓄積・流通・利活用を進めています。DICEにデータ蓄積・共用サービス (RDE) が加わります。RDEは、日々実験室で生まれる研究データをオンラインで迅速に登録することができます。登録されたデータは、自動的に再利用可能な形に構造化するための各種処理（データ分類、メタデータ付与、用語翻訳、フォーマット変換、数値データの可視化や数理統計処理、特徴量⁽²⁾抽出など）が施され、データ駆動型のマテリアル研究に適した形で蓄積されます。蓄積されたデータは、ユーザーや研究グループ専用の領域で使用できることに加え、他の研究グループや他機関のプロジェクトメンバーと共用することができ、マテリアル研究開発のDX化を支援します。さらに、広域での共用化も可能であり、我が国のマテリアル研究開発に貢献できるシェアクローズドデータ領域を形成していくことが期待されています。今後、マテリアル先端リサーチインフラ事業 (ARIM) やデータ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト事業 (DxMT) と連携して「マテリアルDXプラットフォーム」構築を実現します。RDEのデータ収集・蓄積・流通・利活用のイメージを図2に示します。

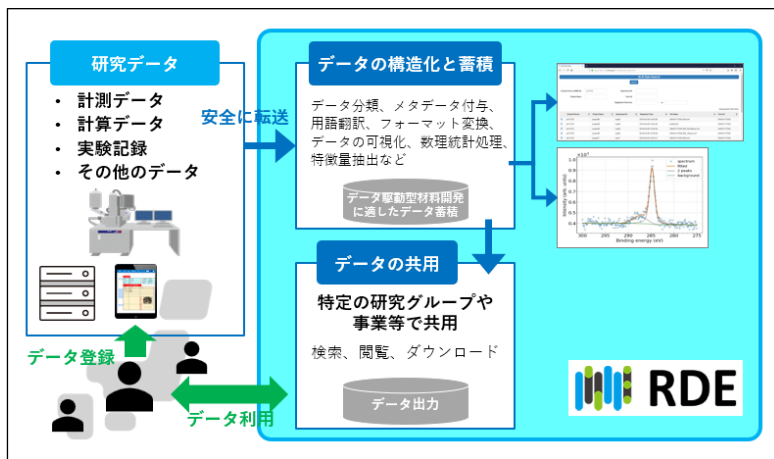


図2 RDE のデータ収集・蓄積・流通・利活用のイメージ

MatNavi をより使いやすく

DICE の1つのサービスである、NIMS 物質・材料データベース (MatNavi) は、新材料の研究開発や材料の選択に貢献することを目的として、材料情報をインターネットで発信し、継続的にデータ拡充を行っています。MatNavi には、高分子、無機材料、金属材料などの8種類のデータベースと3種類のアプリケーションおよび構造材料データシートオンラインがあります。MatNavi は、ユーザー登録を行うことで、無料で各種データベースを検索・閲覧することができます。

DICE の刷新にともない、MatNavi ではユーザーの利便性を高めるための改良を行いました。

- (1) 高分子データベース (PoLyInfo)、金属材料データベース (KinzoKu) : データの管理、データ間の連携を容易に行えるようにデータベースを再構築、検索・表示画面を改良
 - (2) NIMS 構造材料データシートオンライン : 従来、使用できるブラウザに制限がありましたが、新しい描画方式を採用し、どのブラウザを使用してもファイルが閲覧できるように改良
 - (3) 無機材料データベース (AtomWork) : より見やすく使いやすい画面に改良
 - (4) 金属偏析予測システム (SurfSeg)、界面結合予測システム (InterChemBond) : アルゴリズムを追加
- PoLyInfo, KinzoKu, AtomWork, データシートオンラインの画面を図3に示します。

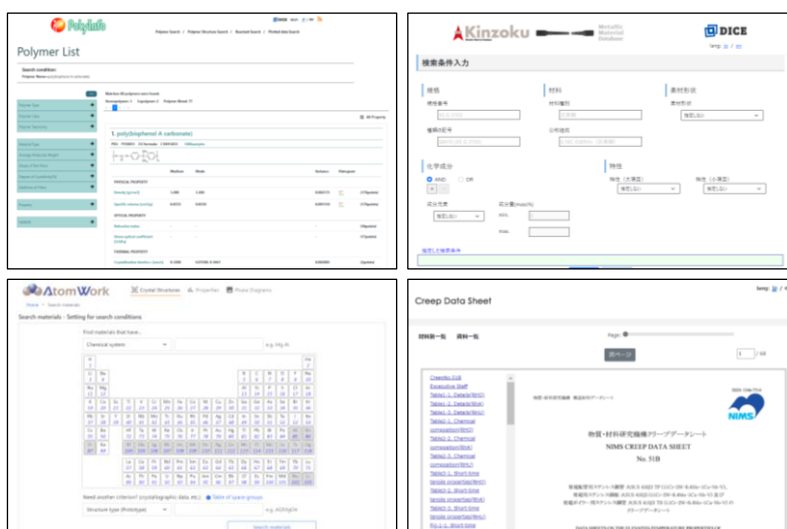


図3 PoLyInfo (左上), KinzoKu (右上), AtomWork (左下), データシートオンライン (右下)の画面

ユーザー認証を一元化

DICE の各サービス間の連携を目的として、新しい認証システムを導入しました。このシステムで付与される DICE アカウント (共通 ID) を利用することで、ユーザー認証を一元化します。利用者は各サービ

スの利用条件を満たしていれば、シングルサインオンでDICEの各サービスにアクセスすることが可能になります。順次、新しいサービスが加わりさらに利便性を高める予定です。

今後の展開

DICEにあるRDEをはじめとする各サービスを活用し、関連事業と協力して全国のマテリアルデータがデータ駆動型のマテリアル研究に適した形でDICEに蓄積できるように推進します。さらに、蓄積されたデータを有効に活用していただくために、MatNaviデータの機械学習向け提供サービス、広域共有化されたデータの利用サービスを段階的に整備するとともに、これらのデータを安全な環境で解析することができるAI解析システムの開発を進めていきます。これによって、我が国のマテリアル革新力の強化に資することで「マテリアルDXプラットフォーム」構築を実現します。

関連サイト

(1) マテリアルDXプラットフォーム構想実現のための取組：

https://www.mext.go.jp/content/20201223-mxt_kibanen01-000011734-10.pdf

(2) DICE (材料データプラットフォーム) : <https://dice.nims.go.jp/>

(3) RDE (データ蓄積・共有サービス) : <https://dice.nims.go.jp/services/RDE/>

(4) MatNavi (NIMS物質・材料データベース) : <https://mits.nims.go.jp/>

用語解説

(1) シェアクローズドデータ：クローズドデータのうち、個別単位を超えた複数の単位で戦略的に共有すべきデータ (限定共有情報)

https://www.mext.go.jp/content/20200602-mxt_nanozai-000007507_1_2.pdf

(2) 特徴量：分析対象データの中の予測の手掛かりとなる変数

<https://www.sbbi.jp/article/cont1/76066#head2>

本件に関するお問い合わせ先

(材料データプラットフォームDICEに関すること)

国立研究開発法人物質・材料研究機構 統合型材料開発・情報基盤部門 材料データプラットフォームセンター データサービスチーム

E-mail: dice_help@nims.go.jp

URL: <https://dice.nims.go.jp/>

(報道・広報に関すること)

国立研究開発法人物質・材料研究機構 経営企画部門 広報室

〒305-0047 茨城県つくば市千現1-2-1

TEL: 029-859-2026, FAX: 029-859-2017

E-mail: pressrelease@ml.nims.go.jp