



2020年10月2日  
第1回 SPARC Japan セミナー2020

# 材料分野の研究データ公開における理想と課題 ～NIMSの事例から～

物質・材料研究機構（NIMS）  
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

篠田陽子

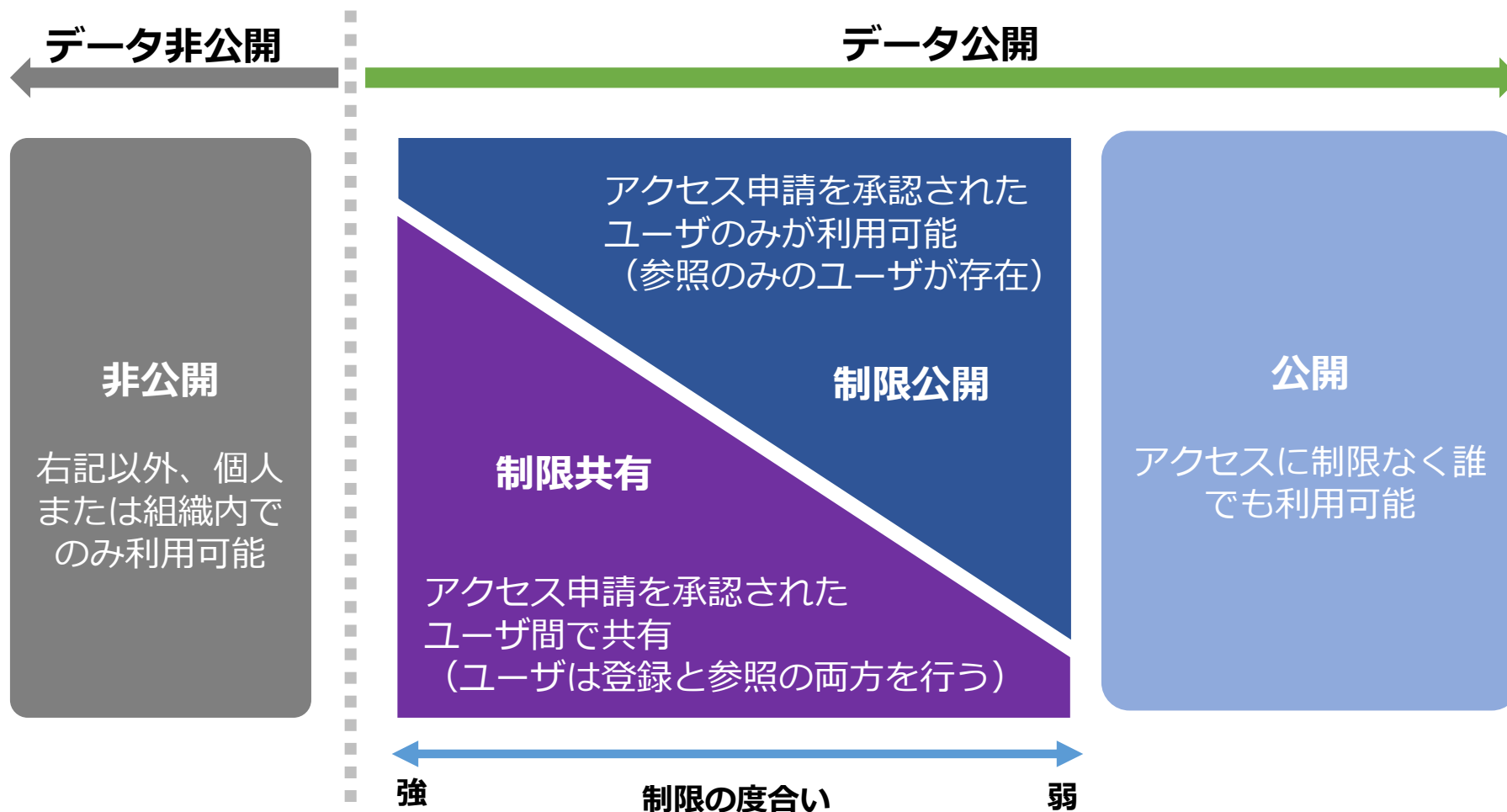
## 本日の発表内容

1. 物質・材料研究機構（NIMS）について
2. 材料分野の研究データ
3. NIMSの研究データ
  - 3-1. 研究データポリシー
  - 3-2. 材料データプラットフォームDICE
4. 研究データ公開における理想と課題

※内容は本日時点のものであり、今後の検討等により変わる可能性があります。

# 本日の発表における用語

※個々のスライドその他で個別に定義されている場合を除く



---

## 本日の発表内容

1. 物質・材料研究機構（NIMS）について
2. 材料分野の研究データ
3. NIMSの研究データ
  - 3-1. 研究データポリシー
  - 3-2. 材料データプラットフォームDICE
4. 研究データ公開における理想と課題

# 1. 物質・材料研究機構 (NIMS) について



国立研究開発法人物質・材料研究機構

National Institute for Materials Science

国内で唯一、物質・材料科学 (Materials Science) の研究を専門とする公的研究機関

所在地：茨城県つくば市内3地区、兵庫県西播磨地区 (SPRING-8内)

役職員数：1,564名 (2020年4月1日現在。定年制職員以外も含む)

研究組織：機能性材料研究拠点  
エネルギー・環境材料研究拠点  
磁性・スピントロニクス材料研究拠点  
構造材料研究拠点(RCSM)  
国際ナノアーキテククス研究拠点(MANA)  
先端材料解析研究拠点  
**統合型材料開発・情報基盤部門(MaDIS)**  
技術開発・共用部門(RNFS)



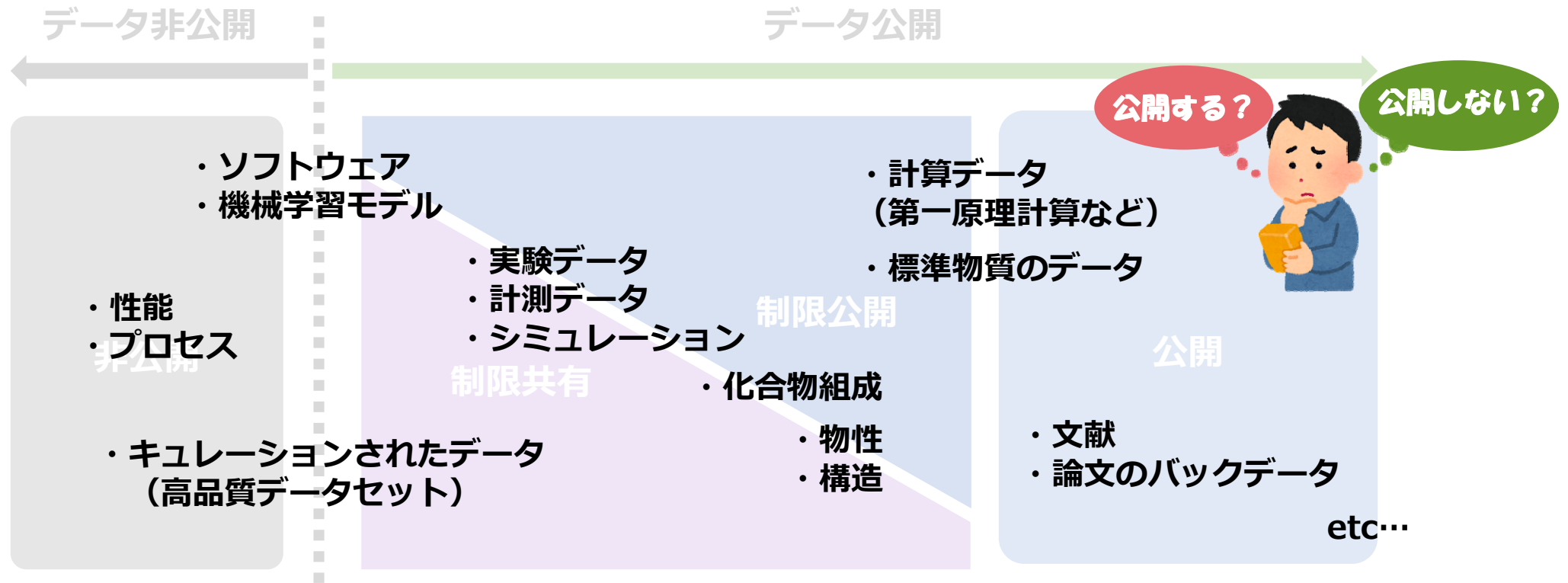
- ・エネルギー材料設計グループ
- ・データ駆動高分子設計グループ
- ・データ駆動構造材料グループ
- ・デバイス材料設計グループ
- ・データ駆動無機材料グループ
- ・SIP-MIラボ
- ・材料データプラットフォームセンター

---

## 本日の発表内容

1. 物質・材料研究機構（NIMS）について
2. 材料分野の研究データ
3. NIMSの研究データ
  - 3-1. 研究データポリシー
  - 3-2. 材料データプラットフォームDICE
4. 研究データ公開における理想と課題

## 2. 材料分野の研究データ



材料分野の研究データは、生物や化学、物理など基礎科学の分野に比べると 相対的にオープンにされにくい傾向にある。

## 2. 材料分野の研究データ

### なぜオープンにされにくいのか？

- ・ 産業界、知財との関連が強い
- ・ 物質 ≠ 材料（社会・産業の役に立つ物質。使われてこそ材料）  
化合物組成・構造や成形プロセスなどは、研究戦略やノウハウに直結しやすい

### 一方で

- ・ オープンサイエンスの流れ
- ・ データ駆動による目的指向型の最適材料設計・開発への取り組み



研究の新たな発展やイノベーションを促進するためには、保護と利活用をバランスをとりながら、**戦略的にオープン**にしていくことが重要





## 本日の発表内容

1. 物質・材料研究機構（NIMS）について
2. 材料分野の研究データ
3. NIMSの研究データ
  - 3-1. 研究データポリシー
  - 3-2. 材料データプラットフォームDICE
4. 研究データ公開における理想と課題

# 3. NIMSの研究データ



## 組織の視点

- ・ 日本全体のイノベーションシステムを強かに牽引する中核機関としての役割
- ・ NIMSの強みであり資産である材料データの利活用



### ● 研究データに対する基本的な考え方や利用ルールの整備

- >>> 国立研究開発法人物質・材料研究機構 研究データポリシー（平成30年8月1日制定）
- >>> サービス約款、利用規約等

### ● データ利活用のためのデータインフラの構築・運用

- >>> 材料データプラットフォームDICE

## 3-1. NIMSの研究データポリシー

国立研究開発法人物質・材料研究機構 研究データポリシー（平成30年8月1日制定）

[https://www.nims.go.jp/nims/disclosure/hdfqf10000001742-att/NIMS\\_research\\_data\\_policy\\_20180801.pdf](https://www.nims.go.jp/nims/disclosure/hdfqf10000001742-att/NIMS_research_data_policy_20180801.pdf)

研究活動を通じて得られる**研究データは重要な知的資産**であり、機構は、これらのデータについて、**適切な管理を行いつつ、広く有効な利活用を図る**よう、積極的な措置を講ずる必要がある。

このため、**NIMSにおける研究データの収集、管理、利活用等に関する基本的な方針**を、「研究データポリシー」として定める。

### ● 基本的な考え方

- ・ 法令、諸規程等に留意しつつ、**NIMSの研究開発戦略や分野特性も考慮**し、適切に研究データの収集・保管と利活用を図る。
- ・ 多様な研究データの各々の**性質や来歴等に留意**しつつ、研究データの取扱いに関するデータ管理計画（Data Management Plan: DMP）を作成する。

## 3-1. NIMSの研究データポリシー



### ●対象とする研究データ

形式：電磁的方式で記録されたもの。

種類：① NIMSの研究成果物等のうち、論文、データベース、ソフトウェア等として一般に公表されたもの。

② NIMSの研究成果物等で一般に公表されていないもの（論文等の公表データの元となったバックデータ等を含む。）のうち、NIMSが組織として収集・保管し、利活用を図るべきものとして選定したもの。

③ NIMSが構築する材料DPF等を通じた利活用を図るため、NIMS外から提供を受けたもの。

## 3-1. NIMSの研究データポリシー

### ● 研究データの提供・供用

- 研究データに関する権利に配慮しつつ、NIMS内外のデータの利活用により、発展的な成果を生み出すことを目指す。
- NIMSの研究開発戦略や知的財産戦略その他の観点で、アクセスの制限や利用の限定などの措置をとりうる。

### ● 研究データの公開\*

\*ポリシーでは、インターネット上で公表し、アクセスできるようにすることをいう。

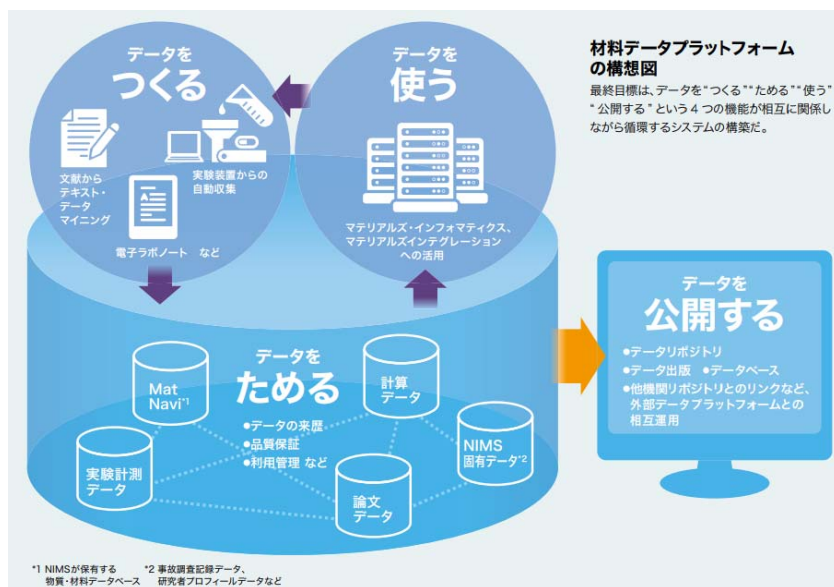
- 研究データのもつ公益性や社会ニーズ等にかんがみ、公開することを原則とする。
- 知的財産権等の保護や個人情報保護その他の観点から配慮が必要なものは公開の対象外
- NIMSにおける情報セキュリティの確保や研究データの適正な利活用の確保等の観点から、必要に応じ、アクセスや利用、第三者への提供等に関して条件を付しうる。

## 3-2. 材料データプラットフォームDICE

材料科学の研究を推進し、材料開発を加速するためのプラットフォーム。  
材料データの入り口（収集）から出口（利活用）までを一貫して扱う。



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



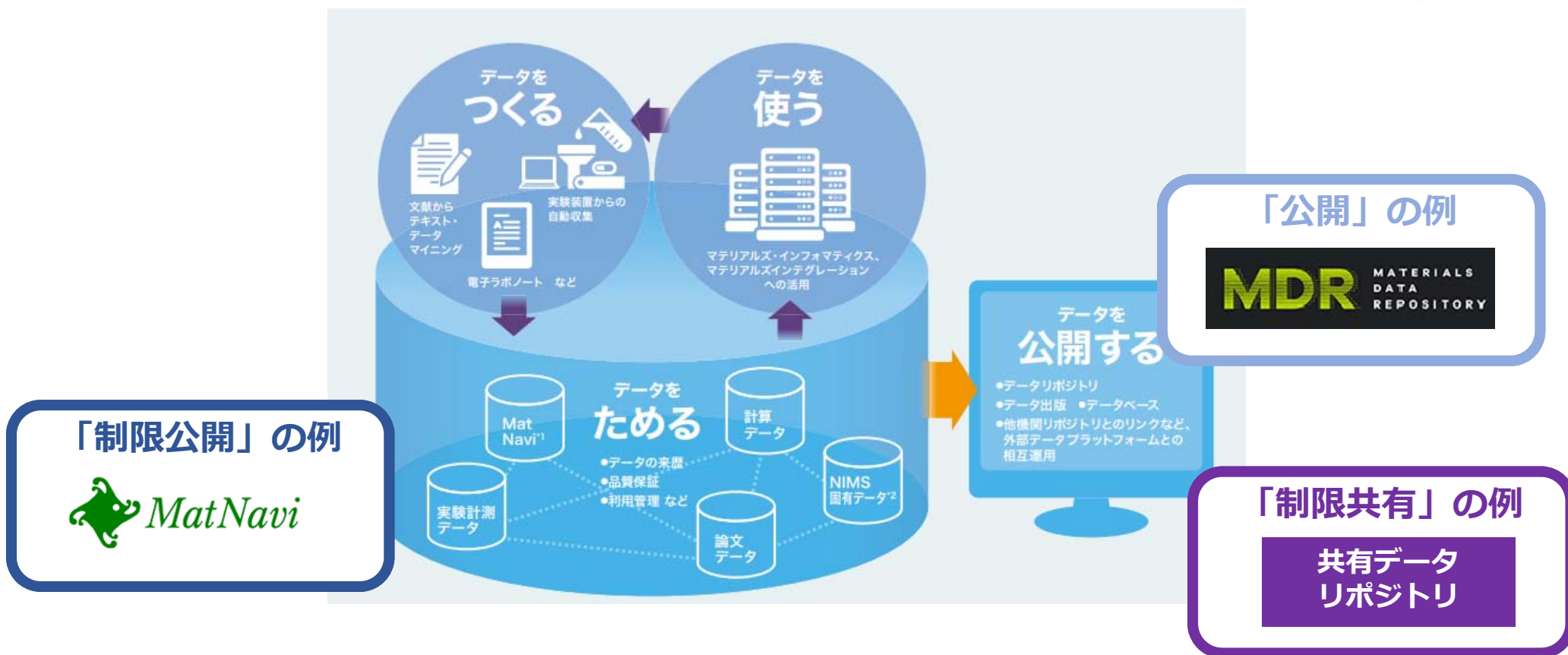
DICEで取り扱うデータの来歴や性質は多種多様。

このため、サービスごとにデータのオープン・クローズを検討

- ・対象とするデータの種類や範囲
- ・データを利用できる者
- ・データの利用条件

などを細かく組み合わせることで最適化

## 3-2. 材料データプラットフォームDICEの事例

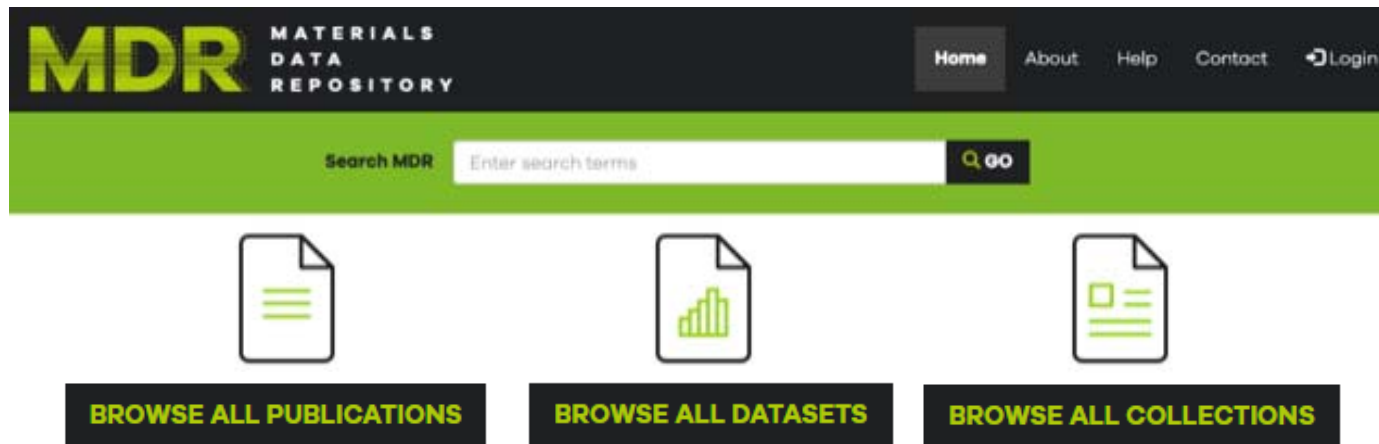


# (1) Materials Data Repository (MDR)

公開



<https://dice.nims.go.jp/services/MDR/>



材料研究データや文献等を収集・保存し、インターネットを介して広く利用できるようにするための公開データリポジトリ。(2020/6/15から公開開始)

- 試料・装置・手法などの材料に関するメタデータ項目をサポート。
- 登録データにはNIMS DOI (デジタルオブジェクト識別子)を付与し、引用可能に。



# (1) Materials Data Repository (MDR)

公開



- 対象とするデータ  
主にNIMSの公知データ（論文発表等により一般に公表されているデータ等）  
論文やこれに付随するデータ、ソフトウェアなど。
- データを利用できる者  
制限なし。誰でも利用可能  
利用者はデータ等の検索・閲覧・ダウンロードが可能（データ登録はNIMSユーザに限定）
- データの利用条件\*  
データ等に記載されたライセンス条件に従う  
データ等を利用した研究成果物等を公表するときは出典を明示する

\*サービス利用に際しましては「材料データリポジトリ利用規約」で詳細をご確認ください。

## (2) NIMS 物質・材料データベース (MatNavi)

制限公開



<https://mits.nims.go.jp/>



高分子データベース



無機材料データベース



電子構造計算データベース

CPDDB

計算状態図データベース



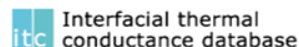
CCT線図データベース



拡散データベース



超伝導材料データベース



界面熱伝達率データベース



高温熱物性データベース



金属材料データベース



中性子反応データベース



傾斜機能材料データベース

READS

放射性物質の除去・回収技術のためのデータベース



複合材料熱物性予測システム



金属偏析予測システム



界面結合予測システム

Weld Thermal History Simulator

溶接熱履歴シミュレーション

高分子、無機、金属などの十数種類の材料データベース等で構成された統合データベースシステム。  
予測システムなどのアプリケーションも提供。

## (2) NIMS 物質・材料データベース (MatNavi)

制限公開



- 対象とするデータ
  - ・ 利活用を図るために、NIMSが組織として収集したデータ（データベース）
  - ・ NIMSが利用及び管理の権限を保有しているデータ
  
- データを利用できる者
  - ・ 利用登録を申込み、これを承認された**個人**（利用は無料）
  - ・ 利用者はデータの**検索・閲覧**が可能
  
- データの利用条件\*
  - ・ **教育又は研究開発目的での自己利用**に限定
  - ・ ウェブスクレイピング等によるデータの大量取得は禁止
  - ・ 成果物公開の際は、機構及びサービス名称をデータの**出典として表示**する

\*サービス利用に際しましては「MatNaviサービス利用約款」で詳細をご確認ください。 21

### (3) 共有データリポジトリ（構想）

制限共有

一般には公表していないデータを中心に、NIMS内外の研究者でデータを提供・共有するためのリポジトリ。NIMS内外のデータの利活用により多様な知の融合を促進する。

- 対象とするデータ
  - ・ 実験データ、論文エビデンスデータなど未公開データ
  - ・ 利用先を限定したいデータ  
など
- データを利用できる者
  - ・ NIMSユーザおよびNIMSと契約した組織に所属するユーザ
  - ・ 利用者はデータの登録および検索・閲覧・ダウンロードが可能
- データの利用条件
  - ・ 契約ユーザ以外の第三者への開示・提供は原則不可
  - ・ 成果発表時の条件：検討中
  - ・ 利用終了時の取扱い：検討中

インフラ  
構築中

## 3-2. 材料データプラットフォームDICEの事例（まとめ）



公開

制限公開

制限共有

サービス名称	MDR	MatNavi	共有データリポジトリ
対象データ	公知データ	利活用を図るため、NIMSが組織として収集したデータ	一般には公表していないデータ（未公開データ、利用先を限定するデータ、など）
データの提供者	主にNIMS	NIMS	NIMS内外の研究者（組織契約をしたユーザ）
データの利用者	制限なし	利用登録をした者	<b>NIMS内外の研究者（組織契約をしたユーザ）</b>
データ利用者ができること	検索・閲覧・ダウンロード	検索・閲覧	検索・閲覧・ダウンロード
データの 利用条件*	<ul style="list-style-type: none"> <li>- 各データ等のライセンス条件に従う</li> <li>- 出典の記載</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- データの大量取得は禁止</li> <li>- 教育又は研究開発目的での自己利用に限定</li> <li>- 出典の記載</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- 第三者への開示・提供は原則不可</li> <li>- 成果の取扱いは検討中</li> </ul>

\*サービス利用に際しましては、規約、約款等で詳細をご確認ください。

## 本日の発表内容

1. 物質・材料研究機構（NIMS）について
2. 材料分野の研究データ
3. NIMSの研究データ
  - 3-1. 研究データポリシー
  - 3-2. 材料データプラットフォーム
4. 研究データ公開における理想と課題

### サービス担当者の視点から

（組織としての考えとは異なっている  
場合もあります）

## 4. 研究データ公開における理想と課題

### ●公開（フルオープン）と制限公開／制限共有の境界線

理想：明確な基準があり、一律に線引き・判断ができる。

課題：データの内容やデータ提供者の考え方によって公開可否の判断は様々。  
時間経過とともに状況が変化することもある（例：論文発表や出願など）  
すばっとした線引きや一律に白黒つけることは難しい。

課題：国研としての役割の中でのバランス。  
知の最大価値化の実現に向けて、どこに比重を置くか？  
「安全」「保護」を意識しすぎると非公開に偏りがち。



## 4. 研究データ公開における理想と課題

### ●データ（提供者）の権利の保護

理想：法律で保護される。

課題：データは無体物であり、民法上、所有権や占有権、用益物権、担保物権の対象とはならない。  
著作権、特許権、営業秘密などによる保護は限定的。  
データの保護は原則として契約を通じて図る必要がある

### ●利活用シナリオ

理想：データ利用者とデータ提供者にとって双方よし

課題：成果の取扱い。データを使って得られた生成物・成果物は誰のもの？（MIやAIで利用したとき）  
約款等で予め扱いを定めておくことが必要になる場合もあり。

課題：データ（提供者）の貢献の評価  
データの引用・利活用状況の可視化（DOI付与や出典記載その他）や組織内で評価に反映する仕組みづくりが必要。



## 4. 研究データ公開における理想と課題

### ●データの提供方法

理想：非公開～公開までワンストップサービスで提供

課題：データの形式や性質は一様ではなく、ステークホルダーも多い。

1つのシステムで多様なデータに対応することは、技術とコストの問題もあり困難。

ルールの面でも、ステークホルダーが多くなるほど調整は難しくなる。

サービスごとに対応しつつ、これらをシームレスにつなぐ仕組みが必要。

### ●費用

理想：ユーザ視点では、費用負担は低いほうがいい。

課題：運用側の視点では、インフラの維持・運用、セキュリティ確保などには多大な費用がかかる。

持続可能なデータ公開のためには、有料化を視野にいれることも必要か。

データを集めるにも公開するにも 費用が発生する時代が来る？

データ公開・利用にかかる費用の増大は、研究活動そのものにも影響がでる恐れあり。

- 材料分野は産業や知財との関連が強く、研究データはオープンにされにくい傾向にあるが、研究の新たな発展やイノベーションを促進するためには、研究データを戦略的にオープンにしていくことが求められる。
- 研究データを保護しつつ利活用を図るためには、データ公開に際し適切なアクセス制限や利用条件を付すことも重要。  
研究データの使われ方や利活用シナリオを念頭に、ハード（インフラ）とソフト（契約・規則など）を両輪としてデータ公開の枠組みをつくっていく。
- 安心・安全なデータ公開を実現するためにはお金がかかる。  
持続可能なデータ公開のためには、インフラの維持・運用、セキュリティー確保にかかる費用も考えていく必要がある。

## DICEウェブサイト https://dice.nims.go.jp/

6月から  
公開開始



The screenshot shows the DICE website homepage. At the top, there is a navigation menu with links for 'データサービス' (Data Services), 'DICEとは' (What is DICE), '利用方法' (Usage), 'お知らせ' (News), '関連サイト' (Related Sites), and 'お問い合わせ' (Contact Us). Below the navigation is a large banner with the text: 'DICE is a data platform for all experts offering quality data and applications for materials science'. The banner also includes a quote from a researcher: 'As a researcher, it is tedious to provide a universal, machine-comprehensible metadata to allow my data to be used in serendipitous ways. As a materials scientist, there is a particular material I am looking for, but I don't know how to do it. As a data scientist, I am looking for materials data that I can use for my data-driven operations. DICE provides three things: high-quality data, applications, and knowledge -- bridging between the domains to aid rapid advancement in materials science.' Below the banner is a 'NEWS' section with three items: '2020.08.17 お知らせ | MDRメタデータ一覧を公開しました。', '2020.08.17 お知らせ | DICE共通メタデータ形式スキーマを公開しました。', and '2020.08.03 お知らせ | サービス停止のお知らせ 8/5, 18:00~18:30 (予定)'. Below the news is a 'SERVICES' section with four cards: 'MatNavi' (Material navigation), 'MDR' (Material Data Repository), 'M-Dac' (Material Data Access), and 'MATERIALS INTEGRATION'. Each card has a brief description and a '詳細へ' (Details) button. At the bottom, there is a '有料サービス' (Paid Services) section with the 'AtomWork' logo and text: '詳細版AtomWorkの特色のデータ、使いやすいインターフェース、データのダウンロード機能をご提供します。'

ご清聴ありがとうございました

今後、様々なサービスを展開予定です。