

令和 4 年度「マテリアル先端リサーチインフラ事業」

ARIM 運営委員会

令和 4 年度はマテリアル先端リサーチインフラ事業 (Advanced Research Infrastructure for Materials and Nanotechnology in Japan, 略称 ARIM, エイリムと発音) の 2 年目ですが、令和 3 年度がナノテクノロジープラットフォーム事業 (装置共用事業) の最終年度であるとともに、ARIM 事業の初年度 (データ構造化の基盤整備のみ) であったため、令和 4 年度は ARIM 事業の本格始動の年でありました。

ARIM 事業の最も困難な課題は、装置共用事業とデータ登録事業の両立にあります。データ登録事業の目標は、装置共用事業によって得られたデータを収集、登録、構造化してビッグデータとし、AI によって新材料を設計開発することにあります。一方、装置共用事業では、地域を中心とした多様な利用者のニーズに応じて、例えば、ユーザー A とユーザー B が同じキチン試料を持ち込まれたとしても、その組成や構造は同じものではないでしょう。その由来や加工方法等のメタデータが詳細に同じ規格で記載されていなければ、マテリアルインフォマティクスの対象にはなりません。近年のデータ駆動型研究等で行われる一般的な統計処理や機械学習アルゴリズムに資する条件としては、scikit-learn のチートシートによれば 50 以上のサンプル数が目安となっています (https://scikit-learn.org/stable/tutorial/machine_learning_map/)。サンプル数が多いほどモデルの精度検討には有利となります。しかし、実際にユーザーが持ち込まれるほとんどの試料は $n=1$ です。本学 ARIM ユーザーで例外的なのが某大学の M 先生で、ある種のポリマーを条件を変えて合成され、年間数百件の GPC 測定を本学に依頼していただき、大越研究室が対応しています。この場合も、詳細なメタデータを含めてどこまでデータを提供していただけるかは今後の交渉を待たねばなりません。大学の利用者の方は、論文掲載まではデータを公開したくない方が多いのですが、ARIM 事業では 2~3 年間の猶予期間 (エンバゴ) を設定してデータ提供者の数を増やそうとしています。

一方、企業ユーザーの場合は更にデータ提供のハードルは高く、特許取得まで待ってもデータ公開を許していただける顧客は少なく、一切公開したくないと仰る方が少なくありません。

ナノプラから ARIM になって大きく変わった点に、ARIM 参加教員がユーザーとして登録可能になったことがあります。その変化の理由としてメタデータを含めた質の揃った大規模データを提供していただけるのは内部教員しかないという期待があります。本学 ARIM 事業は、公立千歳科技大と千歳市、北海道の発展と日本の科学技術、産業の発展のために教職員の皆様と共に努力してまいりたいと願っています。ARIM に装置を登録していただき、学内外との共同研究を進め、メタデータ付きのデータベース形成が可能なデータの提供にご協力くださるようよろしくお願い申し上げます。

I. 装置共用事業

【令和 5 年度登録予定装置】

・学内予算で令和 4 年度に更新された装置

- | | | |
|------------------|------|-------------|
| 1. 分光蛍光光度計 | 日本分光 | FP-8550 |
| 2. X 線回折装置 (XRD) | ブルカー | D8 DISCOVER |

3. 試料作製装置群 グローブボックス 美和製作所 下置きガス循環精製装置付パージ式・ARIM 補正予算で令和 4 年度に購入された装置

令和 4 年度はなし。令和 5 年度は、皆様のご協力で利用件数、利用日数、利用料収入、データ登録数等の評価項目を改善していくことで補正予算の獲得を実現させたいと願っています。

【設備利用約款】

2022 年 10 月 23 日

- ・「設備利用約款」を名大 HUB へ提出

【料金設定】

2022 年 2 月 14 日

- ・ 共用推進委員会委員長からの依頼により以下の 3 点をセンターハブ事務局に提出した。
 - ①各機関での提供される価値の勘案方法
 - ②各機関でのディスカウントの考え方
 - ③共用設備利用料金表

	一般利用（成果報告型） データ共有あり			一般利用（成果報告型） データ共有なし			自主事業（成果非公開型）		
	従量制	大学、公的 研究機関	5,500	円/日	大学、公的 研究機関	6,875	円/日	大学、公的 研究機関、 企業	16,500
	企業	11,000	円/日	企業	13,750	円/日	企業		
定額制	大学、公的 研究機関、 企業	55,000 33,000 16,500	円/年 円/6ヶ月 1ヶ月	設定なし			設定なし		

II. データ共有化

【フィジビリティスタディ（FS）】

フィジビリティスタディ（FS）とは、各実施機関におけるデータ登録の運用、および令和 4 年度から物質・材料研究機構（NIMS）で試運転を開始する「クラウドデータ構造化システム」の運用について表 1 に示される各種のテストを行うことを目的とし、各ハブ機関・ネットワーク機関の事業関係者が持つデータ群（データセット）を NIMS に提供するものです。

表 1：FS での検討内容例

<ul style="list-style-type: none"> ・ 構造化システムへ NIMS 運用者によるデータ登録ワークフローの確認 ・ 利用者が構造化システム登録する上での課題の洗い出し ・ データ共有における見本となるデータセットのショーケース化 ・ データ登録規約（案）もしくはデータ利用規約（案）の整備に向けた事例検討 ・ 料金設定や利用における権利形態などの検討 ・ 安全保障貿易に係る機微技術管理の事前検討 ・ データ利活用する上での課題の洗い出し
--

本学では「分子量の異なるポリスチレンの IR スペクトル」と題してデータ収集を行いました。分子量が2,500~2,000,000のポリスチレン13種類の試料をカートハウス教授が提供し、ARIM 登録の IR 装置を用いて、木村研究室で測定が行われました。波数 2800~3100 の7本の吸収バンドについてピーク波数とピーク強度を比較しました。

2022年7月6日

- ・令和4年度データ蓄積利活用フィジビリティスタディ説明会 15:00~16:30
主催：マテリアル先端リサーチインフラ事業 データ連携基盤委員会

2022年12月26日

- ・FS データを名大 HUB へ提出しました。

【IoT セキュリティデバイス (CYTHEMIS) 設置】

2022年8月24日

- ・データ構造化サービスおよびネットワーク対応にかかる概要説明会 (RDE 概要説明、IoT セキュリティデバイス設置/利用に関する説明) NIMS 主催

2022年11月9日

- ・東芝インフラシステムズ社とのセキュリティデバイス設置の打ち合わせ Zoom (東芝、萩原、河野、伊勢崎、櫻井、大沼、吉田、Karthaus 出席)

2022年11月21日

- ・IoT デバイス設置
- ・初回登録装置 (3 台) : 走査型電子顕微鏡 (SEM、日立ハイテク TM4000 PlusII)、電界放出形走査電子顕微鏡 (FE-SEM、日本電子 JSM 7800F)、核磁気共鳴装置 (NMR、ブルカー AVANCE NEO 400)

【データ構造化システム (RDE)】

- ・データ利用範囲 (RDE 受入マニュアル 2023.01.17 6/33 ページ)

RDE システムで蓄積されたデータの利用は、データセットを管理する研究チームおよび研究チームの親や祖先グループによって利用範囲が限られます。グループ構成の詳細については、グループ・グループメンバの構成を参照ください。データの利用範囲は以下のように変化します。

タイミング	公開範囲
データセット開設~公開直前	データセットを管理している研究チーム内
データセット公開後	研究チームが所属するプロジェクト、もしくは研究チームが属する事業内

- ・RDE の利用の流れ

データセットは、エンバーゴ期限が切れることによって公開されます。公開前であっても、データセットや試料情報は、各情報の管理者の権限によって、他の研究チームと共有することができます。データセットや試料を共有することによって、自身が所有するデータセットでなくても、データセットおよびデータセットに登録されたデータの閲覧と、ダウンロードができるようになります。

2022年12月13日

- ・RDE 機関管理者向け運用説明会 ARIM データ共用チーム主催

III. 評価

【サイトビジット】

2022年10月28日

- ・サイトビジット打ち合わせ会 場所：F204

2022年11月18日

- ・文科省、ARIM センター等による2年に1回の視察（サイトビジット）が行われました。

場所：本部棟大会議室

出席者：プログラム運営委員会（PD 曾根純一、サブPD 伊藤聡、PO 永野智己、PO 田中竜太）、文部科学省（ナノテクノロジー・物質・材料担当、参事官補佐 長田有生、科学技術・学術行政調査員 小椋智、戦略調査・分析係 係員 渡邊なつき）、ARIM センター〈センターハブ機関、運営機構長 小出康夫、ARIM センター運営室 室長 三留正則、業務実施運営統括 内堀千尋、業務実施運営統括 三浦薫〉、横断領域（分子研、太田康仁 特任研究員）、名大 HUB（代表 馬場嘉信教授）、JAIST スポーク（代表 高村由起子教授）、九大 HUB（代表 中尾辰也教授）、東大 HUB（代表 井上佳寿恵教授）、

公立千歳科技大（理事長・学長 宮永喜一、副理事長 井手剛、ARIM 責任者 Olaf Karthaus、研究科長 大越研人、教授 木村廣美、教授 堀野良和、以下公立千歳科技大 ARIM 河野敬一、今井敏郎、伊勢崎政美、櫻井真理、大沼友一郎、吉田慎吾）

2023年1月19日

- ・サイトビジットの結果を踏まえて今後の本学の事業の取り組み方について文科省、ARIM センターから問い合わせがあり、フォローアップ書類を提出しました。

【3年目の中間評価】

ARIM はスタートしてから実質1年ですが、来年度は3年目の中間評価が行われます。学内の皆様のご協力をお願い申し上げます。

IV. 広報活動

2022年9月15日

- ・利用成果発表会 文部科学省研究交流センター ハイブリッド形式
利用課題名「トド松の KSE 機械解繊により得られた KSE セルロースの特性検討」
ユーザー名（所属）：加藤進（加藤バイオマステクノロジー株式会社）

2022年11月10日～11日

- ・ビジネス EXPO アクセスサッポロ
公立千歳科技大 ARIM 事業の紹介のためのポスター展示を行いました

2022年11月

- ・公立千歳科技大 ARIM ホームページの開設
<https://arim.chitose.ac.jp>

2022年11月

- ・公立千歳科技大 ARIM パンフレット（初版）の作成

2023年2月1日～3日

- ・第22回国際ナノテクノロジー総合展・技術会議（nano tech 2023）
東京ビッグサイト 東1,2ホール・会議棟

2023年2月3日

- ・第21回マテリアル戦略総合シンポジウム（JAPAN NANO 2023）
東京ビッグサイト 会議棟1階レセプションホール オンライン併用開催

V. 人材育成活動

【データ人材育成】

2022年10月27日、11月25日、12月22日、2023年1月26日、2月24日、3月24日

- ・「データ人材育成企画」データ構造化オンライン学習 Python 初心者向け) 15:00～17:00

NIMS 主催

2022年10月28日

- ・データ登録勉強会 名大 HUB 主催

2022年12月7日

- ・マテリアルズ・インフォマティクス基礎から応用 チュートリアル連続セミナー
(データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト データ連携部会企画)

日程：12月7日以降の毎週水曜日（12月28日、2023年1月4日を除く）全6回

【技術人材育成】

2022年6月1日

- ・ハブ・スポーク 25 機関 技術支援者意見交換会 河野が発表（4分間） WEB 開催

2022年9月16日

- ・令和4年度学生研修プログラム成果発表会 文部科学省研究交流センター（茨城県つくば市） オンライン(ZOOM)併用

2022年11月7日

- ・技術スタッフ交流プログラム「ナノスーツ法による生きた生物の SEM 観察」 平井先生指導（受講者：NAIST から1名）

2022年11月22日

- ・Bruker 固体 NMR 講習会

2022年12月8日～9日

- ・技術スタッフ集合研修会@東大武田（カートハウス先生出席）

2023年1月20日

- ・技術スタッフ交流プログラム（要望提案型）第1回「合成プロセスデータ構造化・リモート化ワークショップ」

開催者：北陸先端科学技術大学院大学、分子科学研究所

提案者：公立千歳科学技術大学、奈良先端科学技術大学院大学

VI. 会議

令和4年度は、WEB会議が増えたこともあって75件の会議がARIMで開催されました。メンバーとしてあるいは陪席者として科技大ARIM参加者の出席した関連会議を以下に掲げます。

【ナノプラ】

2022年6月28日 ・ナノテクノロジープラットフォーム事後評価検討会（分子・物質合成PF）

【全体】

2022年6月30日 ・第3回マテリアル先端リサーチインフラプログラム運営委員会合同会議

2022年7月22日 ・第11期ナノテクノロジー・材料科学技術委員会（第6回）

2022年11月24日 ・第11期ナノテクノロジー・材料科学技術委員会（第8回）

【ARIM運営機構会議】

2022年3月28日 ・第4回運営機構会議

2022年6月29日 ・第5回運営機構会議

2022年9月28日 ・第6回運営機構会議

2022年12月14日 ・第7回運営機構会議

【ARIM共用推進委員会】

2022年5月26日 ・第4回共用推進委員会

2022年7月21日 ・第5回共用推進委員会

2022年11月2日 ・第6回共用推進委員会

2022年12月19日 ・第7回共用推進委員会

【重要技術領域（次世代バイオマテリアル）】

2022年7月7日 ・重点領域マスタープラン、マイルストーン作成の学内打ち合わせ

2022年7月11日 ・マイルストーン原稿を名大HUBに提出

2022年9月14日 ・マスタープラン、マイルストーンの改定について WEB 会議 出席者：(名大)馬場、高村、山本、(公立千歳科技大)カートハウス、大越、河野

2022年9月20日 ・マイルストーン暫定版を名大HUBへ提出

2022年12月12日 ・マイルストーン初版を名大HUBへ提出

【横断技術領域】

2022年9月16日

・NAIST 服部賢先生来学

横断技術領域（物質・材料合成）連携の強化、公立千歳科技大での情報共有（データ供出法、利用形態等）のために奈良先端科学技術大学院大学の服部准教授が来学されまし

た。

2022年10月7日

- ・合成横断分野のワークショップ開催に向けた打ち合わせ会

参加者：公立千歳科技大（カートハウス、河野）、NAIST（河合）、JAIST（大木）、分子研（太田）

2023年1月20日

- ・第1回「合成プロセスデータ構造化・リモート化ワークショップ」

場所：北陸先端科学技術大学院大学 石川キャンパス

目的：MIにおいて、有機材料、無機材料、複合材料など、物質・材料ごとにプロセスが異なる合成プロセスのデータの収集と整理について理解を深める

本学の担当：ワークショップの提案者の一人としてグループ討議の司会をカートハウス教授が務めました

【学内】

2022年7月12日

- ・令和4年度ARIM運営委員会総会

2022年9月29日

- ・令和4年度ARIM第1回コアメンバー会議

2023年2月20日

- ・令和4年度ARIM第2回コアメンバー会議