

jh241010

材料分野における実験・シミュレーションデータの統合データプラットフォームの構築：全国規模の運用にむけて

研究代表者 華井雅俊（東京大学情報基盤センター）

概要

現代の材料科学研究において、最先端実験施設とスーパーコンピュータ間での効果的かつ大規模なデータ管理は不可欠である。しかし、既存の多くのデータシステムは主に小規模な機関間連携や単一ドメインの運用に焦点を当てており、多様な研究者からの大量データを扱うために必要なスケーラビリティ、効率性、機敏性、学際性が不足している。これら問題を解決するために、本研究では日本全国の材料科学のためのデータプラットフォームを目指す「ARIM-mdx データシステム」を開発している。今年度において、申請時の 186 ユーザーから、報告時（2025 年 5 月）までで、1247 ユーザーまで拡大する事ができた。引き続き、先駆的な全国規模の材料データプラットフォームとして、新たな学際研究コミュニティの創出とイノベーション加速への貢献を目指していく。

1. 共同研究に関する情報

(1) 共同利用・共同研究を実施している拠点名

東京大学 情報基盤センター
mdx

松村大樹 実験データユースケース
(SPring8)

大西正人 シミュレーションデータユースケース

安永竣 実験データユースケース（クリーンルーム）

(2) 課題分野

データ科学・データ利活用課題分野

豊倉 敦 実験データユースケース（クリーンルーム）

(3) 参加研究者一覧と役割分担

石川亮 実験データユースケース（電子顕微鏡）

田浦 健次郎 システム担当

鈴木豊太郎 システム担当

河村光晶 シミュレーションデータユースケース

岡根 哲夫 実験データユースケース

(SPring-8)

藤川 誠司 実験データユースケース
(SPring8)

村上恭和 機関連携・実験データユースケース
(九州大学)

山本剛久 機関連携・実験データユースケース
(名古屋大学)

2. 研究の目的と意義

近年、機械学習分野の社会的な盛り上がりやマテリアルズインフォマティクスの発展などから、材料科学データの重要性がますます強調されている。材料の開発研究においてデータはおおよそ 2 つに分類され、1 つは理論計算によって生み出されるシミュレーショ



ンデータ、もう 1 つは実際の材料実験装置（電子顕微鏡や放射光装置）から得られる実験データである。今日における個々の材料研究開発において、それらの相互的なデータ解析・データ同化は不可欠であり広く一般的に行われている。一方で、実験とシミュレーションを統合した大規模なデータ収集や利活用、更に汎用的に利用可能な大規模データセット構築などは未だ決定的な提案がなく、課題が多い。よりハイレベルなデータ駆動型研究を支える基礎インフラとして、本研究では材料用大規模データ集積・解析基盤を構築し主にシステム面の問題解決に注力する。加えて様々なユースケースでその検証を行う。

本研究は、(i) 全国各地の大型共用実験施設、(ii) スーパーコンピュータ、及び (iii) mdx を連携させた材料研究用大規模データ基盤の構築および、その全国的な運用を最終的な目標とする。学術組織から産業組織に至るまでの様々なユーザーをターゲットとし、情報分野の非専門家に向けたサービスであるため、利便性・安全性・容易さを最優先としながら、その上で本格的な大容量データ集積や大規模データ処理にも耐えるような高機能性を最大限追求する。人手などによる実験作業を含んだ Experimental-in-the-loop なフローを考慮に入れたドメイン特化型の効率

的・効果的データ解析基盤の実現をめざす。

3. 当拠点の公募型共同研究として実施した意義
本課題は、物理学・材料科学における実験系分野と理論系分野及び、情報科学における高性能計算分野とデータ科学分野にまたがる学際的課題であり、また、材料実験装置は国内の各大学・研究機関に設置されているため、組織横断的な研究実施体制で実施した。データ収集のためのストレージとして mdx の大規模ストレージ及び ARIM ペタスケールストレージを利用し、データ処理基盤のために mdx の計算リソースを活用した。

4. 前年度までに得られた研究成果の概要
該当なし

5. 今年度の研究成果の詳細
本研究では、日本全国の材料科学のためのデータプラットフォームを目指す「ARIM-mdx データシステム」(<https://arim.mdx.jp/>)を開発・構築した。このプラットフォームは、計算データと実験データの両方を効果的に扱うことができる全国規模の材料科学データインフラストラクチャを目指している。申請時 186 ユーザーから、最終報告の現在(2025 年 5 月)までで、1247 ユーザーまで

拡大した。

5.1 Overview

ARIM-mdx データシステムの要件と貢献は以下の通りである：

(i) 安定性とセキュリティ

材料科学データには、有害物質や経済的に重要な新材料に関する機密情報が含まれる場合があるため、システムは幅広いセンシティブティレベルのデータを管理するための高い安定性とセキュリティを維持する必要がある。ARIM-mdx データシステムでは、安定性とセキュリティを確保するため、パブリッククラウドや共用ストレージシステムではなく、ペタスケールの専用ストレージシステムを基盤としている。このような分離されたセットアップにより、物理的な運用を完全に制御することが可能になる。さらに、ネットワーク無効化された施設コンピュータからの安全なデータ転送を確保するため、データ転送メカニズムを IoT デバイスにオフロードし、施設コンピュータ上のセキュリティリスクを軽減している。

(ii) スケーラビリティと効率性

実験施設やスパコンの進歩により、これらはより豊富なデータをより高いレートで生成するようになっている。例えば、最先端の Cryo 電子顕微鏡は、単一の材料あたり最大 TB スケールのデータセットを生成する。大量のデータを処理するためのスケーラビリティと効率性は、全国的なサービス展開にとって明らかに重要である。

計算リソースを前述の分離されたストレージ側の設定を維持しながらスケーラブルにするために、ARIM-mdx データシステムは計算リソースとストレージリソースを分離するハイブリッドアーキテクチャを採用している。前者を一般利用の学術クラウドに割り当てることで、ARIM-mdx データシステムはストレージ側の安定性とセキュリティを確保しながら、スケーラブルで効率的な計算を維持している。

(iii) 機敏性と学際性

材料研究は異なる機関の複数のドメインからの研究者間のコラボレーションを伴うため、計算リソースへの需要は変動する可能性がある。これは、リソース集約的で予測可能なバッチワークロード（従来のスーパーコンピュータワークロード）だけでなく、実験中の対話型データ分析のための即時リソースも必要とする。

ARIM-mdx データシステムは、クラウドシステムから高性能対話型計算リソースを提供し、同時にスーパーコンピュータから結果を効率的に転送するための高性能ネットワーク接続を確立することで、この混合ワークロードを処理している。

5.2 設計指針

ARIM-mdx データシステムは以下の設計指針に基づいて構築されている：

(i) **使いやすさ：** 理論系と実験系の両方の材料研究者に共通の大規模で高性能なデータインフラを提供するためには、大量のデータを処理する能力を維持しながら、使いやすさを最大化することが重要である。スーパーコンピュータでよく使用される従来のツールは理論分野の研究者には馴染みがあるが、実験分野の研究者にはそれほど馴染みがないことが多い。そのため、Open OnDemand のような Web ベースのインターフェースや GUI などのユーザーフレンドリーなインターフェースに基づいたサービスを構築することが適切である。

(ii) **インタラクティブとバッチワークロードの混合：** 材料科学の典型的な研究ワークフローでは、インタラクティブとバッチの計算ワークロードが混在している。例えば実験研究では、装置（電子顕微鏡など）を使用して実験中に即時データ分析が行われるのに対し、理論研究では物理シミュレーション（DFT や MD 計算など）がスーパーコンピュータ上で行

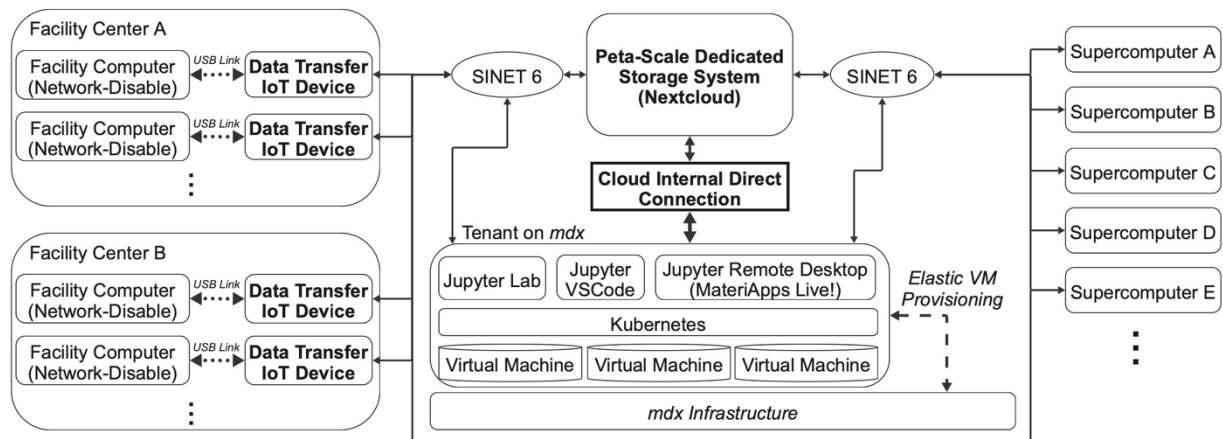


Fig. 4. System implementation.

われる。そのため、両方のソースからのデータを効果的に処理するには、両方のニーズに対応する柔軟な計算リソースを提供することが重要である。

(iii) **安全なデータ転送:** 典型的な実験装置はスタンドアロンセットアップで管理されている。これは操作コンピュータが特定のセットアップ向けに特別に調整され高度に最適化されているため、例えばわずかなセキュリティ OS アップデートでも機器制御に害を及ぼす可能性がある。このようなネットワークに接続されていない機器からの直接リモートデータ取得は、ARIM-mdx データシステムに大規模データを効率的かつ安全に転送するために必要である。

図にシステム実装の詳細を示す。システムインフラストラクチャは、ペタスケールのデータストレージシステムと mdx クラウドシステムから構成され、SINET6 とデータ転送 IoT デバイスを介して施設やスーパーコンピュータに接続されている。

このインフラストラクチャの上に、システムは Jupyter ベースのコンテナ化された計算サービスとオープンソースのクラウドストレージサービスである Nextcloud を提供している。Jupyter 環境のソフトウェアパッケージは、材料科学のためのオールインワンオープンソフトウェアスイートである MateriApps

LIVE!に基づいている。エラスティックなコンテナ管理のためのミドルウェアコンポーネントは Kubernetes に基づいて実装されている。

システムインフラストラクチャにおける主な特筆点は、クラウド内部直接接続と IoT ベースのネットワーキングにある。

(a) クラウド内部直接接続

このアーキテクチャにおける主要なシステムレベルの課題は、インタラクティブなデータ分析のために Jupyter 環境が展開されている mdx クラウドと、ペタスケールの専用データストレージ間のアクセスレイテンシである。専用ストレージ上のデータは mdx 側の Jupyter からインタラクティブにアクセスされるため、それらの間の非常に低いレイテンシアクセスが使いやすさのために必要である。しかし、従来のネットワーキングアプローチでは、mdx クラウドとストレージ間の接続は通常、外部ネットワークゲートウェイを介してルーティングされる。このルーティングは、mdx クラウドとストレージシステムが物理的に互いに近接していても、クラスター間レイテンシをもたらす。

この問題を解決するため、ARIM-mdx データシステムはクラウド内部直接接続を確立し、mdx クラウドと専用ストレージ間に直接、専用の物理ネットワークを作成している。mdx のレイヤー2 ネットワーク仮想化を利用して、mdx 上の仮想クラスターをその物理ポートの

1 つに拡張する。そして、このポートを専用ストレージに接続することで、mdx クラウド内の他の仮想クラスターに影響を与えることなく、仮想化されたイントラネットワークを確立する。この主要なアイデアは AWS Direct Connect、Google Dedicated Network、Azure ExpressRoute に似ているが、外部ネットワークゲートウェイをバイパスして mdx の内部ネットワークに直接接続する点が異なる。

(b) スタンドアロン材料施設の IoT ベースネットワーク

もう一つの重要なシステム課題は、上で議論したように、実験装置コンピュータに標準的なネットワーク環境を確立することの困難さによるものである。

ARIM-mdx データシステムでは、このようなスタンドアロン装置コンピュータからの直接データ転送のために、データ転送 IoT デバイスを広く設置している。このネットワークの背後にある主要なアイデアは、スタンドアロン装置コンピュータの USB ボリュームインターフェースを利用することである。IoT デバイスは装置側に USB OTG g_mass_gadget を使用して USB フラッシュドライブを模倣し、デバイスはリモートでクラウドストレージに接続されている。したがって、装置コンピュータのユーザー側からは、IoT デバイスは USB フラッシュメモリとして認識され、ユーザーは実験データをこの偽の USB ボリュームフォルダにコピーするだけでよい。データがこの偽の USB ボリュームフォルダにコピーされると、IoT デバイスは自動的にデータをシステムのクラウドストレージに転送する。さらに、この USB ベースのデータ転送をユーザー認証と統合することで、システムは装置コンピュータ内の (Ethernet ベースの) インターネット接続なしに、実験データをユーザーごとにストレージに安全にリモート配布することができる。

5.3 評価

この評価の目的は、クラウド内部直接接続によって達成された性能向上と、ストレージ、mdx クラウド、スーパーコンピュータ間の広域ネットワークの性能特性を示すことである。

mdx は、外部および内部接続の両方に 100 Gb/s ネットワークを含む。SINET6 は 400Gb/s ネットワークインフラストラクチャ上に構築されている。mdx クラウドとストレージシステム間の物理ネットワーク接続は、10GbE ネットワークスイッチに基づいている。

左図は、ARIM-mdx データシステムのストレージシステムへの様々なソースからの ping アクセスレイテンシを示している。

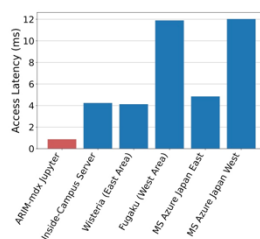


Fig. 5. Access latency.

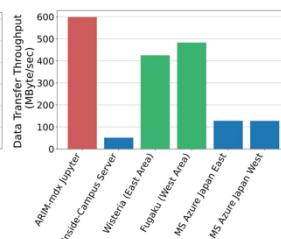


Fig. 6. Data transfer throughput.

ARIM-mdx Jupyter: mdx クラウド上の Jupyter 環境から専用ストレージシステムへのアクセスレイテンシを示している。その値は 0.87 ミリ秒 (ms) である。クラウド内部直接接続のおかげで、そのアクセスレイテンシはイントラクラスター環境 (典型的には 0.3 ~ 0.5 ms) と同様のパフォーマンスである。

Inside-Campus Server: mdx クラウドと同じ建物に物理的に配置されているサーバーからのアクセスレイテンシを示している (ただしネットワークは直接接続されていない)。その値は 4.24 ms であり、これはネットワークが mdx クラウドへの一般的なルートを紹介しているためである。パケットは一度地域のアップストリームにルーティングされた後、外部ネットワークゲートウェイを介して mdx クラウドに下っていく。

Wisteria (East Area): 東京大学の

Wisteria スーパーコンピュータからのアクセスレイテンシを示している。その値は 4.13 ms であり、これは Wisteria が mdx クラウドと同じ建物に配置されているためである。

Fugaku (West Area): 富岳からのレイテンシを示している。神戸と東京の間の物理的距離により、その値は 11.9 ms となっている。

MS Azure Japan East/West: Microsoft Azure サービスの日本東部リージョンと日本西部リージョンの仮想マシンからのレイテンシを示している。ストレージサーバーは東京地域（日本の東側）に位置しているため、レイテンシは Japan East で 4.85 ms、Japan West で 12.03 ms となっている。

全体的な結果から、サーバーがストレージに物理的に近くても、アクセスレイテンシはインタラクティブコンピューティングには不十分であることが明らかになった。クラウド内部直接接続により、イントラクラスターレベルのアクセスレイテンシが達成され、インタラクティブコンピューティングに寄与している。

右図は各サーバーと ARIM-mdx データシステムのストレージシステム間のデータ転送スループットを示している。Rclone copy（並列転送 4 の ver. 1.67）を使用して 1GB の 10 ファイル（合計 10GB）を 5 回転送し、中央値を報告した。

ARIM-mdx Jupyter: ARIM-mdx データシステム上の Jupyter コンテナとストレージシステム間のスループットを示している。クラウド直接接続のおかげで、そのスループットは最高のパフォーマンスを示している。その値は 598.8 メガバイト毎秒 (MByte per sec) である。

Inside-Campus Server: キャンパスネットワークに接続するコモディティネットワークスイッチのボトルネックにより、低パフォー

マンスを示している。イントラキャンパスネットワークが高性能インフラストラクチャを使用しているにもかかわらず、スループットは低いままである。その値は 51.65 MByte per sec である。

Wisteria (East Area): Wisteria スーパーコンピュータと ARIM-mdx データシステム（ストレージサーバー）間のパフォーマンスを示している。Wisteria から ARIM-mdx データシステムへの接続は SINET6 を含む高性能インフラストラクチャを使用している。そのため、高スループットを達成し、その値は 425.5 MByte per sec である。

Fugaku (West Area): Wisteria と同様に、SINET6 によって非常に高いスループットを達成している。その値は 512.8 MByte per sec である。Wisteria と Fugaku 間のわずかな性能差は、プログラムが実行されたそれらのストレージシステムとログインノードの仕様によるものである。

MS Azure Japan East /West: Microsoft Azure の仮想マシンからのスループットを示している（Standard_D4_v3 インスタンスタイプ、4 vCPU と 16 GB メモリを使用）。それらの値はそれぞれ 128.3 と 128.0 MByte per sec である。それらの低いスループットは、パブリックインターネットとクラウドプロバイダーによって課された帯域幅制限によるものである。

全体を通して、クラウド内部直接接続と SINET6 の利点を示している。パブリックインターネットをバイパスして SINET6 を完全に活用することで、システムは大規模なデータ転送を非常に効率的に処理するように構成されている。

最後に 2023 年 8 月から 2024 年 8 月までの 1 年間の運用からの統計データを示す。表は年間使用に関する全体的な情報を示している。アクティブ化されたユーザー数は 140 以上の組織から 837 人であり、73.7%のユーザーは学

術界から、26.3%は産業界からである。ARIM-mdx データシステムを利用している研究プロジェクトは 377 件あり、プロジェクトあたり約 2.48 人の研究者の平均となっている。総データ量は約 40.6 TB であり、11%が実験データ、89%が理論データである。データファイルの総数は約 9.05 百万で、データ量の分布とは対照的に、実験データファイルが理論データファイルよりも多い。

TABLE I
STATISTIC FOR ONE-YEAR TRIAL USE.

# of Users	839
- # of Academic Users	629
- # of Industrial Users	220
# of Research Projects	377
# of Organizations for Users	140+
Total Volume of Materials Data	40.6 TB
- Volume of Experimental Data	4.5 TB
- Volume of Theoretical Data	36.1 TB
Total # of Data Files	9.05 M
- # of Experimental Data Files	5.82 M
- # of Theoretical Data Files	3.23 M
# of Facilities Connected to Data Transfer IoT devices	50
# of Supercomputers Utilized by ARIM-mdx's Users	6

5.4 運用で得られた知見

1 年間の運用を通じて、いくつかの重要な知見と教訓を得ることができた：

(i) 共用実験施設からの安全かつ効率的なデータ抽出と保存の重要性

ユーザー調査によると、50%以上のユーザーは安全かつ効率的なデータ抽出にのみ関心があり、各研究者は通常、データ分析のための独自のツールをすでに持っている。アクセスログによると、Nextcloud の日次アクティブユーザー数は Jupyter サービスの 10 倍である。

(ii) 実験材料研究のための共通されたリモートサービスの欠如

理論研究者と実験研究者の比較で、コラボレーションの機会に大きな格差が明らかになった。理論研究者はスーパーコンピュータのような共有リモートツールの恩恵を受け、システムチュートリアルやワークショップを通じてアクティブなコミュニティ活動が実施される一方、実験研究者は物理的に分離された施設と限られた共通リモートツールにより地理

的制約に直面している。この制限により、研究交流は学術会議などの一般的なイベントに限られることが多い。

ARIM-mdx データシステムは、実験研究者のための先駆的な全国規模のリモートツールとして構築され、理論分野のスーパーコンピュータで達成されたものと同様に、広範な研究コミュニティを育成し活性化する大きな可能性を秘めている。この発展は、理論研究者と実験研究者間のコラボレーション能力の既存のギャップを埋め、将来的にはより統合された多様な研究エコシステムにつながる可能性がある。

(iii) 理論データに比べて疎で小規模な実験データ

材料科学実験は計算手法に比べて本質的にコストがかかり、しばしば手動操作を必要とする。この事実により、研究者は主にターゲット材料に密接に関連する領域に焦点を当てることになる。その結果、個々の研究プロジェクトによって生成されるデータセットは、材料の広範な景観内でローカライズされる傾向がある。この状況は、より包括的で一般化可能な機械学習モデルやデータベースの開発を追求する上で大きな課題を提示している。

6. 進捗状況の自己評価と今後の展望

進捗に関しては計画どおり進んでおり順調である。 **申請時 186 ユーザーから、最終報告の現在 (2025 年 5 月) までで、1247 ユーザーまで拡大した。**当初の目標である“本格運用を含んだ社会実装”を実現しつつあり、今年度継続課題として、システムの改良と広報活動に努めていく。

システムの概要に関して IEEE BigData 2024 に論文が採択され、総勢 20 名ほどの共著論文として国際的なプレゼンスを実施することが出来た。また、東京大学からのプレスリリースおよび、5 件の招待講演を実施した。

インフラとしては安定運用のフェーズに入りつつあり、今後はユースケース研究の実施により注力していきたい。例えば、本システムを利用しデータ集約を行った、固体材料の熱伝導に関しての大規模 DFT 計算 [M. Ohnishi, et.al Preprint 2025] や、本システム上で開発の電子顕微鏡データのデノイズ手法 [T. Kusumi, et.al M&M 2025] など、実際の利用ケースに応じたシステムの機能向上を実施していきたい。

また、本システムは材料研究に特化したデータ基盤として構築しているが、本システムのアイデアや知見を一般化しより広く貢献することを目的に、東京大学での次期スーパーコンピュータの設計・システムデザインにも積極的に参加している [M. Hanai et.al ISC 2025]。