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

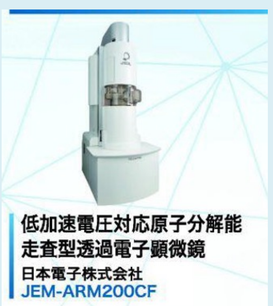
課題番号 jh241010
東大情報基盤センター 華井雅俊

1.背景: 文科省マテリアル先端リサーチインフラ (ARIM)

ARIM Japan

全国25大学・研究機関の材料実験設備共同利用プロジェクト

- **全国1000以上の共用装置**
- **アカデミックから企業まで幅広い利用**
- 電子顕微鏡、X線回折装置、大型放射光,…
- 利用者からのデータ提供サービス

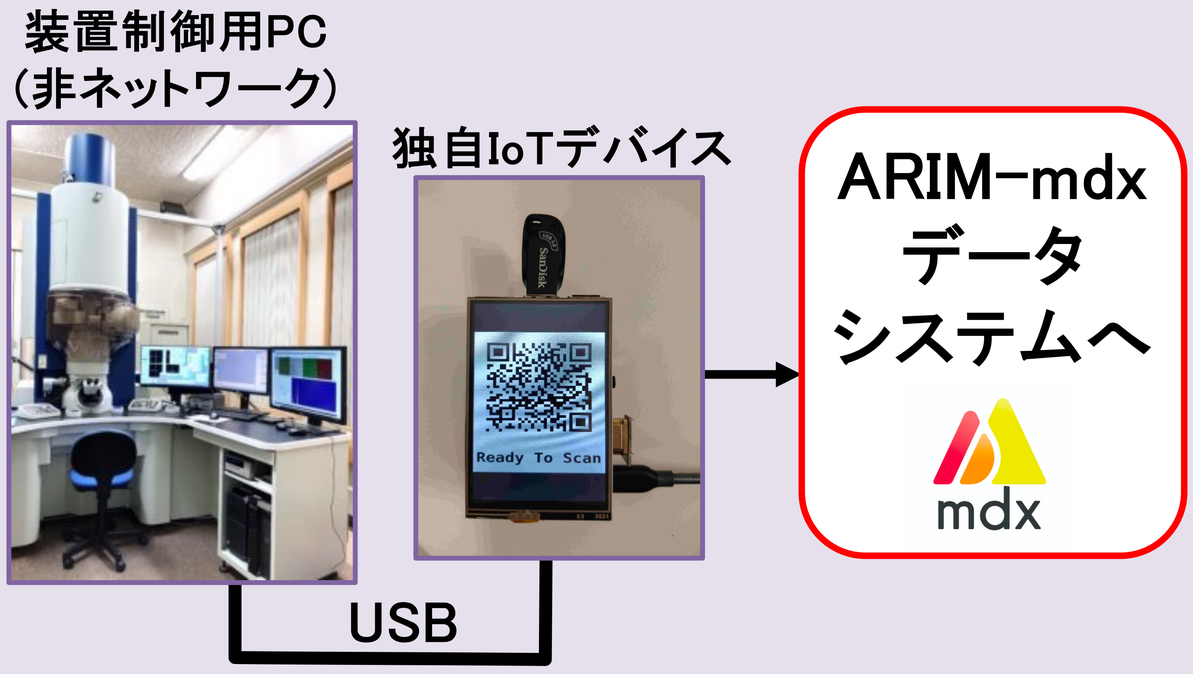


2. ARIM-mdx データシステム

- **全国の大型実験施設とスーパーコンピュータから創出される材料データ (実験データとシミュレーションデータ) をmdxの超大規模クラウドストレージに集約**
- mdx上の高性能仮想化計算環境でデータ処理
- 各データサービス (NII GRDM, NIMS RDE) との連携

3. 非ネットワーク装置用データ転送IoTデバイス

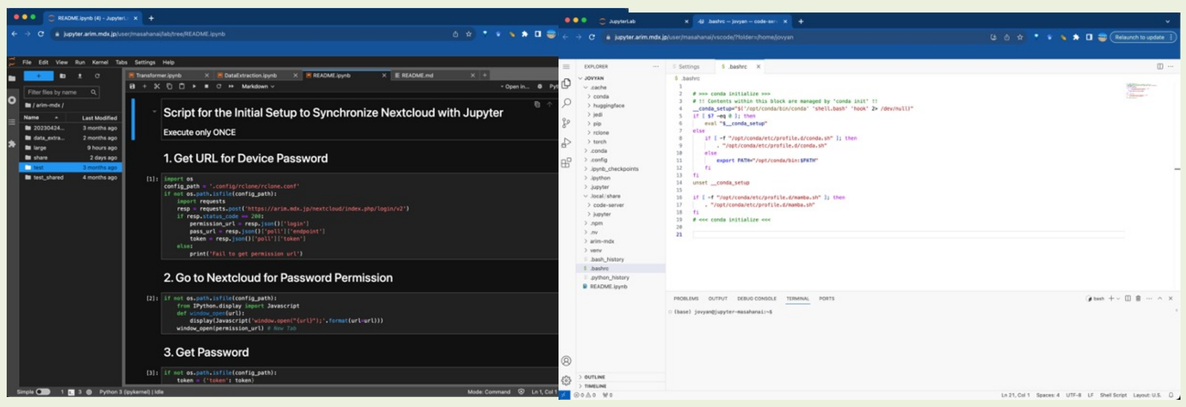
- **インターネットに繋げられない実験装置からの効率的なデータ転送**
- **IoTデバイスがUSBメモリをエミュレート**
- **ユーザー管理と連携し各自フォルダへ自動振り分け**



M. Hanai, M. Kawamura, R. Ishikawa, T. Suzumura, and K. Taura, The 16th IEEE/ACM International Conference on Utility and Cloud Computing (UCC 2023).

4. 高性能 Jupyterサービス

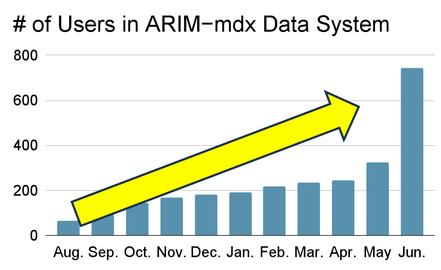
- **mdx 上の仮想化計算環境をJupyterによって提供**
- **転送したデータをmdx上で解析**
  - **Jupyter Notebookでお手軽データ解析**
  - **VScodeでガッツリ開発**
  - **Remote Desktop で GUI解析**



5. 各種データサービスとの連携

- **NII Gakunin RDM (研究管理サービス) とのデータフォルダ共有・連携**
- **NIMS RDE (材料データ公開システム) へのデータ提供**

GakuNin RDM　RDE

6. ユーザー数

- 今年度8月末から東大の装置利用者を中心に一般利用開始
  - 学外ユーザーや企業ユーザーを含めて現在753の利用ユーザー
- 理論分野プロジェクトと実験分野プロジェクトが独立に利用中
  - データ科学分野を融合した3分野の横断的な取り組みに注力