

XAFS DB に関するアンケートのまとめ

一國伸之(千葉大学)・木村正雄(KEK)

- ・ XAFS DB に至るまで . . . (木村)
- ・ XAFS DB に関するアンケートのまとめ (一國)

Materials informatics (Society 5.0)で XAFS dataが有効に活用されていくために…

✓ X線XAFSラウンドロビン活動(光ビームプラットフォーム)



✓ PF XAFS DB →(deposit)→NIMS MDR
148件

✓ ユーザーが測定データをdepositできる環境整備

- XAFS DB Workshop (朝倉, 木村) 2018~
- NIMS MDR (SPRING-8, 立命館, 北大, PF) 2022~
- ユーザーデータの積極的な公開のお願い 2022~

背景（問題意識）

1. ユーザーにとっての目安が欲しい

「正しく測定できている？」

「報告例と違うけど、試料のせい？測定法？施設のせい？」

- * XAFSがメインでない(特に企業)研究者で重要

- * 新たなユーザー拡大のためにも

2. 施設スタッフにとっても目安があると良い

- * 自身の測定法の妥当性の確証、高度化の基準、...

- * より親切的なユーザー対応

「* * 施設で測定したデータなんですけど、…」

3. データベース構築、データの情報科学処理化、への対応

XAFS Database Workshop

第1回2018.9.5@北大(JXAFSの後) (北大・朝倉清高先生、KEK・木村ら提案)

＞ Databaseを取り巻く環境の議論

第2回2019.3.1@秋葉原(光ビームプラットフォームシンポの前)

＞ Database構築の具体的検討 (どこで、誰が、どの様に)

第3回2019.9.2@京大(JXAFSの前)

＞ 具体的なDatabase format等の議論

第4回2020.1.9@名古屋(JSSRRの前)

＞ 運用案の検討。

メタデータ案、Benten(JASRI)活用、NIMS 材料DBと連携

→2020.9.10JXAFS迄に確定してβ版として始動

⋮

【ポイント1】 どのような方針でデータを集めるか？

- ・ 厳選されたデータを対象にする（メタデータ）
（各施設での自動収集も、それを意識して）集める

【ポイント2】 データー公開の方針をどう考えるか？ データは誰のモノ？

- ・ 各施設, BL, 制度,..によって方針が大きく異なるため、可能な部分から開始。

【ポイント3】 DBをどこかに統合する？ 箱をどこに置く？ Incentive?

- ・ NIMSデータベース（各施設でもNIMSでもどこでもOK）
- ・ 「共通のDOIを付与する」と「そのデータを閲覧・検索するエンジンを整備」で、
統一的な活用, incentive付与を目指す

【ポイント4】 他のDBとの連携？ Materials informatic (Society 5.0)への？

- ・ NIMS 材料データベース

XAFS database @ NIMS MDR

<https://mdr.nims.go.jp/collections/qz20st57x>

MDR MATERIALS DATA REPOSITORY

Home About Help Contact Login

Search MDR Enter search terms GO

Home | MDR XAFS DB

MDR XAFS DB

User Collection MDR Open

Works (2175)

Sort by: relevance Results per page: 10 REFRESH

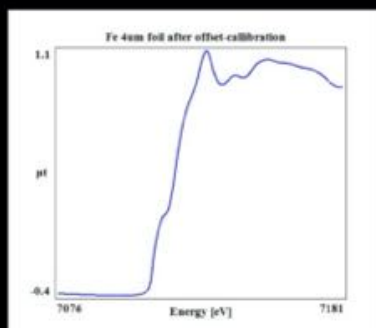
Title	Date Added	Visibility
 XAFS spectrum of iron Is part of: MDR XAFS DB	06/07/2022	MDR Open
 XAFS spectrum of Platinum Is part of: MDR XAFS DB	06/07/2022	MDR Open
 XAFS spectrum of iron(III) oxide Is part of: MDR XAFS DB	06/07/2022	MDR Open

XAFS spectrum of Iron

MDR Open

ANALYTIC

XAFS spectrum of Iron



In Collection:

MDR XAFS DB

This dataset consists of X-ray absorption fine structure (XAFS) spectra at Fe K-edge of Iron measured at Photon Factory BL-9A, and is a part of XAFS database (MDR XAFS DB, <https://doi.org/10.48505/nims.1447>) as a collection of MDR

Description

DOI

<https://doi.org/10.48505/nims.3615>

Creator

Name Yota Takamura
Organization Tokyo Institute of Technology
Role depositor

Contact agent

Name Photon Factory
Organization KEK

Keyword

BL-9A
Fe
Fe K-edge
Iron
Photon Factory
Pure metal
Si(111)
XAFS
collection - MDR XAFS DB

まとめ 1 : ユーザーのデータを広く集めるためには？

～成果登録のプロセス,incentive,・・・～

(1) 実験時のReference等の標準データ

- ・ 集めやすい（実験を行ったその場で公開を承認可では？）

(2) 個別の実験データ

論文、知的財産化、ノウハウ等の観点での判断が必要。実験終了後の一定期間後に、データ選択して供与・公開（ボランティアベース）。

(3) データの供与・公開のincentiveとして、データのcreditを明確化する。そのため DOI付与を行う。以下の様な活用が考えられる

(3-1) DOIが論文発表前につくケース：

論文内にDOIがついたデータが掲載され、データ自身が広く活用されることが期待できる

(3-2) DOIが論文発表後につくケース：

論文に直接明示できなかったデータも含めて実験データを公開、実験成果としてcredit確保

(4) より積極的なデータの収集

一定期間後に自動的に公開する等…。施設の特徴/制度に大きく依存するため、慎重な検討が必要。
(例えば、PFでは、ユーザーとの意見集約・合意の後、公募時に明記するなどの
具体案をPF-PACに提案することが必要)

まとめ2 : データの質をどう担保する？

～見本となる標準データと色々な膨大データの区別～

(1) Depositsされたデータ中の“データ測定者名” で区別 (提案)

- ・放射光施設の関係者等が公開すべき標準データ: creatorの記入方法を測定した施設名にする
creator = Ritsumeikan SR center, PFなど
- ・メタデータにenergy calibrationのデータ and/or calibrationの方法を明記

(2) 各ユーザーの実験データをdepositする際に推奨されているcalibration data が標準データと混ざらないか？

- ・メタデータにenergy calibrationのデータ and/or calibrationの方法を明記しておけばよい

(3) 多様化するデータにどのように対応していくか (今後の検討課題)

- ・同じサンプルについて異なる測定法 (ex. 時分割, 顕微法) で計測した場合？
全体/個別に「work」としてdeposit?

XAFS DB に関するアンケートのまとめ

一國伸之(千葉大学)・木村正雄(KEK)

- ・ XAFS DB に至るまで・・・ (木村)
- ・ XAFS DB に関するアンケートのまとめ (一國)

XAFS DBに関するアンケートのまとめ

千葉大学 一國伸之

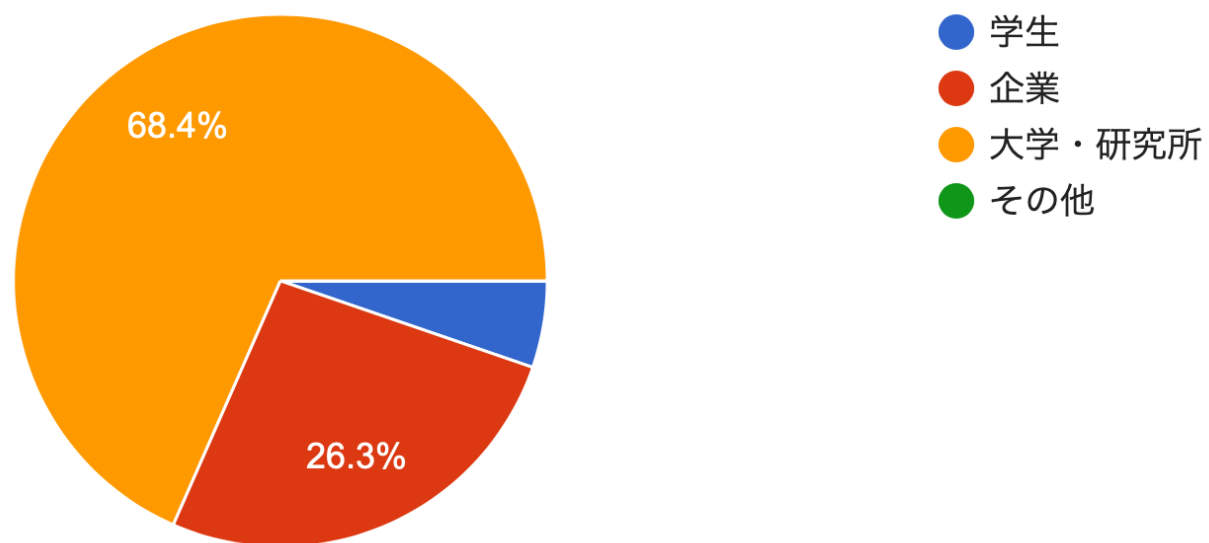
今回のXAFS討論会のナイトセッションで、XAFS DB (XAFS Data Base) に関して議論を深めていく目的で、6/1からアンケートを実施しました。

7/14時点で19件の回答をいただきました、ありがとうございます。

ここでは、それを紹介させていただきます。

1. 所属を教えてください

19 件の回答



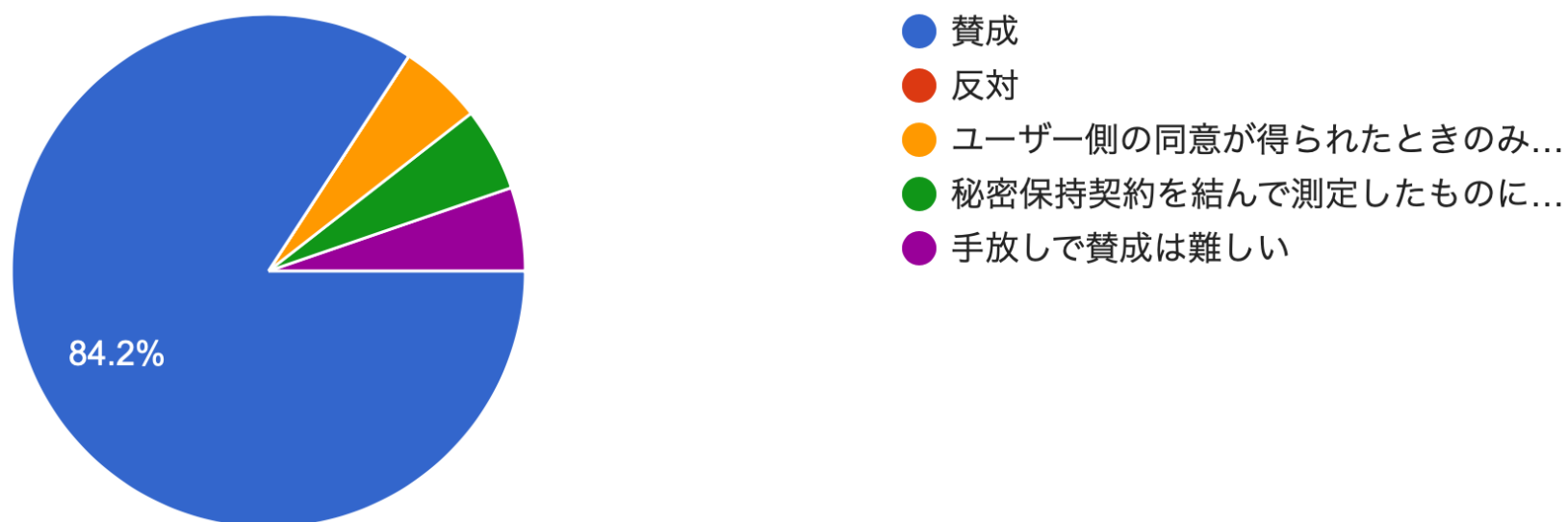
Ⅱ 『ユーザーの測定データの取り扱い』

2-1.

ユーザーの測定データを施設が管理すること*について

(*バックアップのための保管，計測法高度化のため施設内限定での利用等)

19 件の回答



基本的には賛成という回答だが，懸念を感じているユーザーがいるのも事実

2-2. 2-1の回答について理由やご意見を教えてください。

1. データの真偽の確認、計測法高度化のため施設内限定での利用、のために必須と思うから
2. 実験データは企業にとって機密情報にあたるので、測定データを一律で施設側管理とされると利用が出来なくなってしまう。NDAを結ぶとしてもハードルが高い。
3. 物構研やユーザーの利益に直結するため賛成
4. 実際問題、施設以外で管理が出来るとは考えにくい
5. データ利活用は今後不可避と考えております
6. その気になれば、施設が勝手にデータを収集して使う可能性もあるので、測定機器やプログラムを提供している施設は、きちんとルールを決めて管理すべき。
7. ユーザー側に拒否権があるものとして、機密保持に注意した上で保管できれば良いと考える。
8. 論文発表後の利用に限定してもらいたい。
9. 管理いただいて良いものもありますが、企業としては様々なフェーズのサンプルがあり一律に賛成反対を決めることは困難です。
10. ユーザーおよび施設間での同意は必要かと思います。
11. 施設の高度化に利用していただけるのなら本望です。
12. バックアップがあると安心する
13. 基本的には賛成。ただし、企業ユーザーなどは施設が管理しない道も残されていても良いと思う。特別な理由がない限り、施設側も管理という方向でいいと思う。

知財問題
契約・合意

Ⅱ 『ユーザーの測定データの取り扱い』

2-3. ユーザーの測定データの公開について

19 件の回答



施設によるデータ管理より賛成比率やや低下
データが勝手に使われることへの危惧

2-4. 2-3の回答について理由やご意見を教えてください。

- 1.税金が投入されている施設での利用結果であり、研究者のcreditや知的財産の配慮・確保をした後は（一定期間後は）公開されるべきと思うから。
2. 実験データは企業にとって機密情報にあたるので、全測定データが公開となると利用が出来なくなってしまう。標準試料のデータの提供には協力するが、原則は非公開としていただきたい。
3. 自前で解析・解釈を行う前にデータを利用されては困る。すくなくとも論文の出版までは非公開を選択可とすべき。
4. お試し測定も多くあるので、公開か非公開かは選択させてほしい。
5. XAFSという手法そのものの発展や利用の拡大にはデータの公開は必要なこと考える
6. きちんとしたフォームや約束の下での測定データの公開が、この分野のカルチャーになるとよいと思います。
7. ユーザーが優先的にデータを使用できるように、ある程度の期間をおく必要があると思いますが、施設との共同研究によるデータは原則公開すべき。
8. 強制ではなく任意という条件付きなら良いと思う。その分野で有名な方のデータがあると、参考になったりするかもしれない。
9. これも発表後の条件付きで賛成です。
10. ユーザーが了承していれば良いと思いますが、そのデータの所有者はだれになるか等取り扱いについて規定が明示されている必要はあると思います。
11. 計測データは企業機密に相当するため基本的には困難です。
12. ユーザーの同意は必要かと思います。
13. 秘匿性の高いデータ以外は、公のものとして扱っていいと思います。
14. 自分がとったデータを他の人が使用する、参考にするのは、成果をとられる、誤解を生むなどのトラブルが懸念されるため
15. 基本的には全公開で賛成。企業ユーザーなどは公開しない道も残されていても良いと思う。特別な理由がない限り、公開という方向でいいのではないのでしょうか。

III 『ユーザーの測定データを公開する場合』

3-1. 公開の条件は何ですか（例：時期、creditの有無、DOIの有無、etc）

1. 研究者の**credit**や知的財産の配慮・確保をした後
2. 開示時期を設定できるようにするのがよいと思います。
3. ユーザー側の同意
4. ユーザーによる公開時期の設定、**credit必須**
5. 成果占有契約で無ければ無条件
6. **credit**の有無
7. エンバーゴ、ライセンスの設定は必要と思います。
8. 施設との共同研究で、税金が使われている以上、ある程度の時期において、原則全て公開し、誰でも再利用可能。
9. **論文公開後**
10. 企業ユーザーなので、公開は了承しないと思います。
11. **社内手続きで許可が得られる** こと。
12. 特にない。即時公開でいいと思います。
13. 公開時期の選択（即時、数年後 等々）、**credit**の選択（測定者・グループを表示、非表示を選択できるようにしたほうがデータは集まるのではないだろうか？）、DOI有

3-2. メタデータ（試料の情報等）の入力をユーザーが行うことについて

19 件の回答



メタデータの入力とデータ公開の抵抗感と同程度

3-3. 3-2の回答について理由やご意見を教えてください。

1. 標準データとしての利用にはメタデータは必須であるが、情報科学的利用では吸収端だけわかれば良いケースもあると考えるため。
2. DOI は例えば論文とか一定のまとまった **Document** に割り当てるのが通常なので、個別のデータに DOI を割り当てるのは不適當だと思います。（例について）メタデータをユーザーが割り当てるのは実効性が無いと思います。システム側で割り当てることのできる項目のみが現実的かと思います。
3. 他者が行うのは無理なのは...？
4. 論文に記載しないノウハウ等を出すのは面白いと感じる。オリジナリティのある測定方法を公開することで共同研究の幅が広がると期待できる。
5. 試料の情報が無ければデータベースとしての利用価値が著しく低下する
6. サンプルの情報などユーザー以外分らない（けれども必須のもの）があると思います
7. 負担にならないよう、必須項目が少なく、最低限の入力で、メタデータ入力用のプログラムや表計算ソフト等で、その場、もしくはあらかじめ入力しておく。その情報を測定プログラムに読み込ませて測定し、データとともに保存する

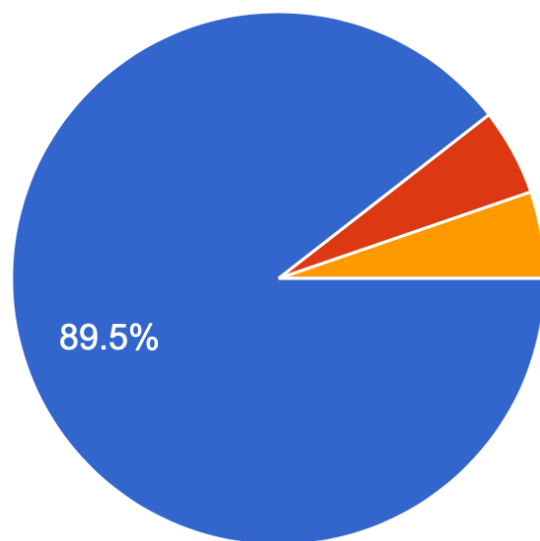
3-3. 3-2の回答について理由やご意見を教えてください。

8. スタッフの方では入力できないような情報もあると思うので、可能な限りユーザーが行うべきと考える。
9. 手間ですが、**試料についてはユーザーしか把握していません**ので。
10. エネルギー校正や分解能などは既定のやり方を定めて、それで保証されているものでないと使いにくいです
11. **手間を考えると反対ですが企業としては出せる情報と出せない情報があるためユーザー入力でなければ難しい。**
12. 測定条件等は測定機器から自動で読み込めるようにして欲しい。
13. 施設側で設定できるところはしていただいて、ユーザー側でしか入力できない箇所はユーザーが入力するのがよいと思います。
14. **分析していることを公開したくない試料がある**ため
15. メタデータを入力するのは労力が必要なのでなるべく機器からの自動入力が望ましい。ユーザーしか知り得ないメタデータはユーザーが行う。ただし、**ユーザーが入力するのはせいぜい5項目くらいが限度**だと思う。また、フリーフォーマットのメモ欄のようなものがあったら良いと思う。

IV 『XAFSデータベースについて』

4-1. あなたはXAFSデータベースが必要ですか？

19 件の回答



- 必要
- 不要
- 必要と感じるが実際にはほとんど使わ...

有効性は評価されている

4-2. 4-1の回答について理由やご意見を教えてください。

1. (新規) ユーザーの便のため
2. 学生や初学者のために参照データがあるのがよいと思います。
3. 入手困難な標準試料等のスペクトル情報にアクセスできるため
4. 以下のように活用しているほか、今後測定する吸収端について利用したい。
5. 標準的な試料は参考にしたい。
6. 実験データがオーソライズされることにより、データ自体から有意義な結果が得られなかったとしても、研究そのものが実施されていることの証明になる
7. 利活用しやすく、広い材料分野をつなげるカギになるデータベースと思います
8. 価数の違いや構造の違いが識別できるかについて、事前もしくは事後にスペクトルを比較確認評価するときが必要。
9. 同様の組成の試料を測定した場合でも、スペクトルが異なることは多々あるため、参考にできるデータはあった方がよい。
10. 解析の妥当性を評価するとき、あれば役に立つ場合もあると思います。
11. 特別に合成した素性のわからない触媒、のようなものは必要ありません。純物質や化合物の一般的なスペクトルが入手できれば比較に使えると思います。
12. 標準試料のデータベースなどがあると助かると感じますが、サンプルを入手できるものは実測します。ニッチなサンプルや入手が難しいサンプルについてデータが欲しいと感じることもあるが、まれなので結局ほとんど使わないかもしれない。そうしたサンプルはデータベースに存在しないことがほとんどのため、結局役に立った例がありません。
13. 個別で入手できる標準物質だけでは、解析できないものもあるため、標準試料のデータベースがあるとありがたい。
14. 将来的に、利用が高まると思います。
15. XAFSデータベース構築とその活用によって測定、解析、解釈、ユーザー数などが広がると思う。

4-3. XAFSデータベースをどのように活用しますか？

1. 自身のデータとの比較
2. 標準データとして.
3. 自分の試料の相同定や解析標準として
4. 標準的な試料のスペクトル確認や学生へのテーマ説明に使っている。
5. 参照試料を確認するため
6. 自身の実験が正しいかどうかの判断や標準試料を再測定することの無駄をなくす
7. 参照試料として利用
8. 私は運用側ですが、他のデータベースと繋げて材料全体を俯瞰できるようにしたいと思います
9. 価数の違いや構造の違いが識別できるかについて、事前もしくは事後にスペクトルを比較確認評価する。自分の標準試料が間違っていないかのチェックに使う。エネルギー校正や分解能に注意した上、論文に引用する。
10. 同様の組成の試料を測定した際の比較やスペクトルのクオリティの差異の確認
11. 今のところは、未だ思いつきません.
12. 自身で作成した化合物の定量、比較に標準的な試料を使いたいです
13. ニッチなサンプルや入手が難しいサンプルのデータを参照する。
14. 定性およびパターンフィッティング等
15. 参照試料を自身で測定した際の確認や、将来的には機械学習に利用したいと考えている。
16. 現状では、自分の測定元素のスペクトルを参照するなど等では活用していないが、データベースとそれらを活用した研究が進めば、測定中に似たようなスペクトルのデータを表示、分類、そのデータが使われている論文の紹介などまでされるようになり、活用範囲がXAFS界の活性化にもつながると思う。

V 『その他』

5. XAFSデータベースに関してご意見がありましたらコメントください。

1. 多くの人の意見を集約して頂ければ幸いです。
2. 試料濃度が不適切で測定データのクオリティが不十分だったり、エネルギー校正方法が不明だったりすることを防ぐため、試料調製やエネルギー校正のガイドラインの規定が必要だと考える。
(試料濃度の決定方法、エネルギー校正方法の明示など。可能であれば、同時に測定した金属箔・基準化合物のデータと紐づけておく。)
3. エネルギーのきざみなど、データのフォーマットが決められているとデータを提供しやすい。
4. MDR XAFS DBに登録をご検討いただければありがたいです。
<https://mdr.nims.go.jp/collections/qz20st57x?locale=en> <https://doi.org/10.48505/nims.1447>
5. ユーザーが使いたいデータは意外と種類は少ないのではないのでしょうか。Cu foilのXANESばかり何個もデータベースに**deposit**されても仕方ないと思います。
6. 大学・研究機関と民間企業で一律のルールにすることは難しいように思います。
7. 本活動を応援しています。引き続き、がんばってください。
8. データベースには反映されないと思われる、細かい分析のテクニックがあり、それがわからない限り中途半端なものになるのではないかと危惧する。