



Japan Open Science Summit 2022 Session D2「研究データへのDOI登録」

NIMS Materials Data Repository における研究データへのDOI登録運用

松田朝彦, 田辺浩介, 石井真史, 小野寺千栄, 廣澤智恵子, 桑島功, 門平卓也, 谷藤幹子

物質・材料研究機構(NIMS) MaDIS 材料データプラットフォームセンター(DPFC)

 <https://orcid.org/0000-0001-5989-027X>

研究データ利活用協議会 ジャパン・データリポジトリ・ネットワーク

RDUF JDARN

Research Data Utilization Forum

Japan Data Repository Network



CC BY 4.0,
ただしロゴ・他資料引用・©マーク部を除く



材料データプラットフォーム “DICE”

実験・計測装置、文献等からのデータ取り込み、
データ管理・解析環境、データ共有・発見までを扱うシステム群

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



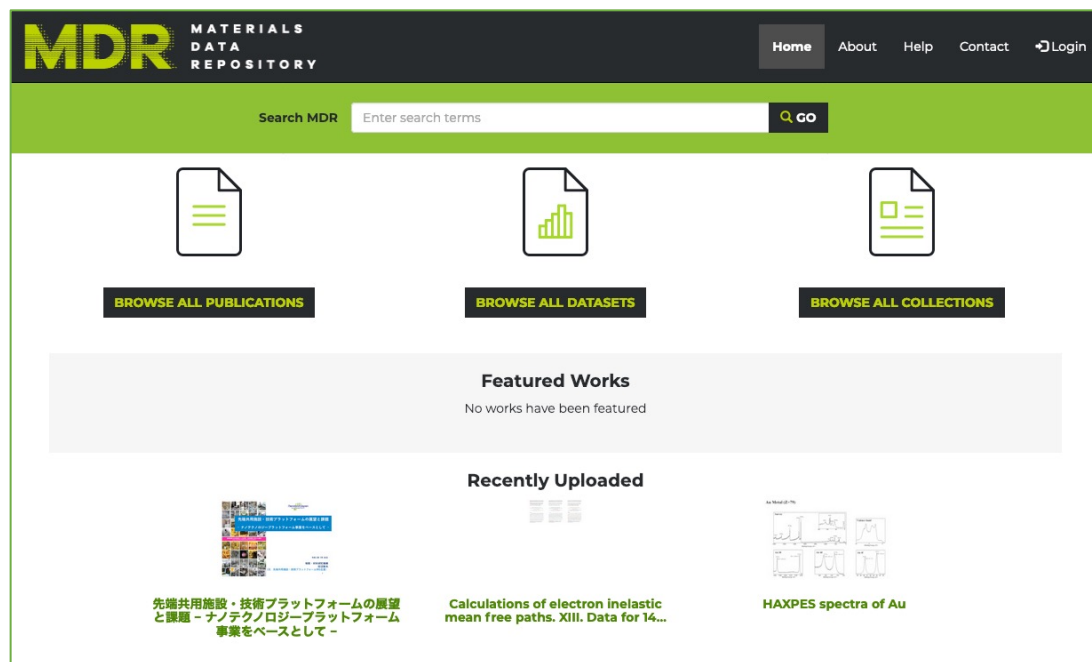
Materials Data Repository (MDR)

DICEの「データ公開」担当サービス

研究成果のセルフアーカイブを基本とする前リポジトリ (2009～) から
公知データをデータ駆動型研究に利用可能とするリポジトリへ (2020～)

MDR MATERIALS
DATA
REPOSITORY

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



Dataset 1925件, Publication 1265件

2022年5月末現在

前リポジトリ NIMS eSciDoc (PubMan, Imeji)
からの公開データの移動含む

ソフトウェア: Hyrax by Samvera

DataCite DOI を付与



DataCite=研究データに主眼を置くDOI登録機関

NIMSは2021年2月よりDataCite member

MDR登録データは外部サービスに収集される

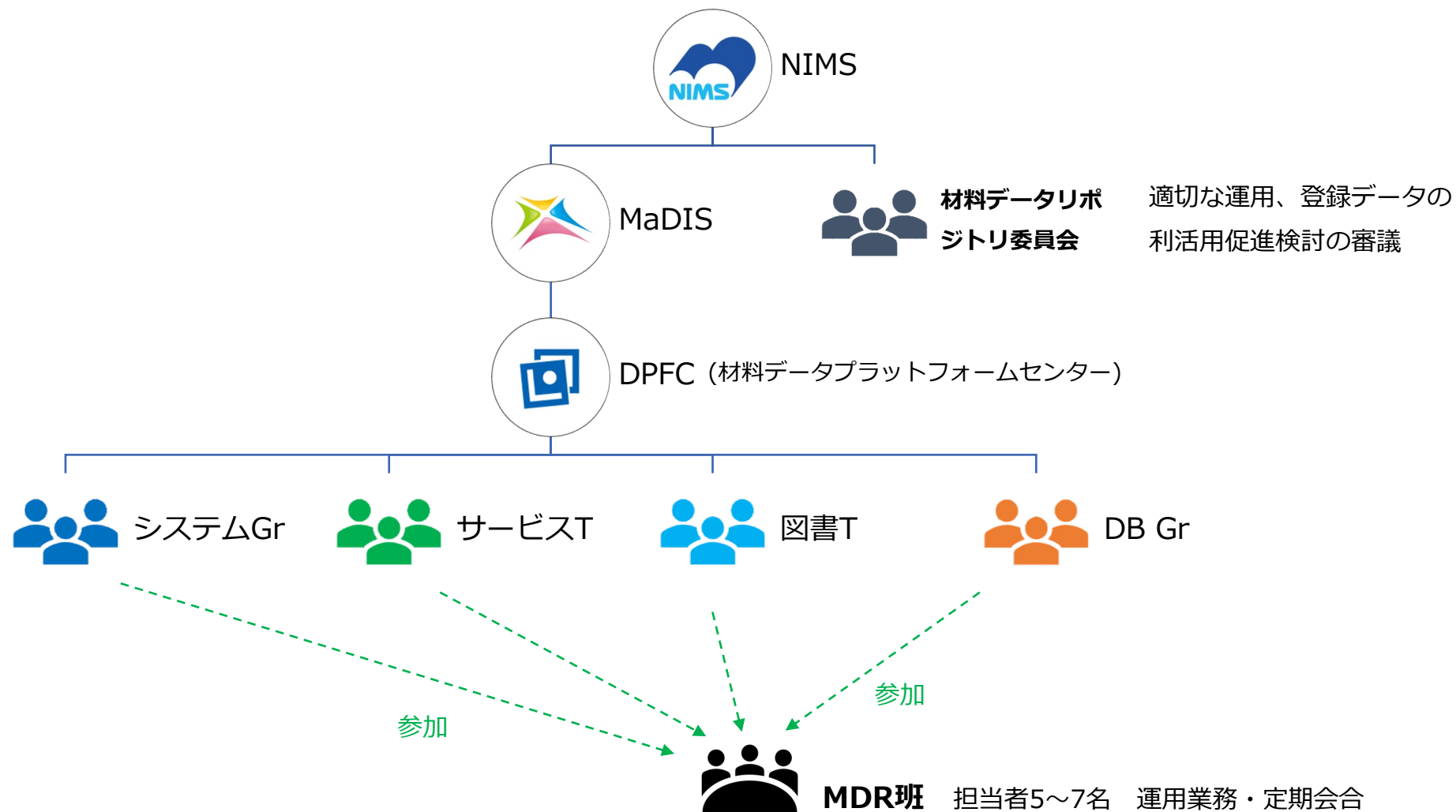
DataCite Search

Clarivate™
Data Citation Index™



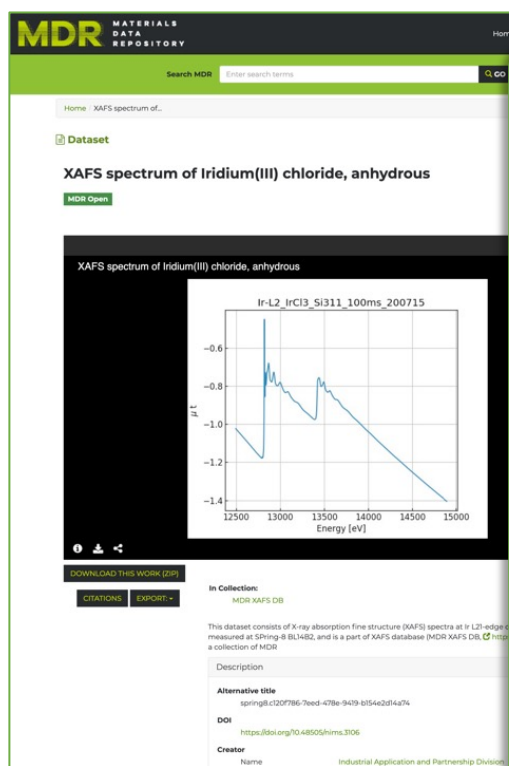
Google Dataset Search

組織



MDR登録単位

- 1 Publication work = 論文1報
- 1 Dataset work = ? (粒度はデータ次第)



<https://doi.org/10.48505/nims.3106>

Work

- メタデータ記述
- Publication型とDataset型がある
- DOI付与 (例外あり)

Item
(.dat)

Items

個別の
ファイル

Item
(.txt)

Collection:

- Workを束ねたもの
- DOI付与 (例外あり)

Work

Item

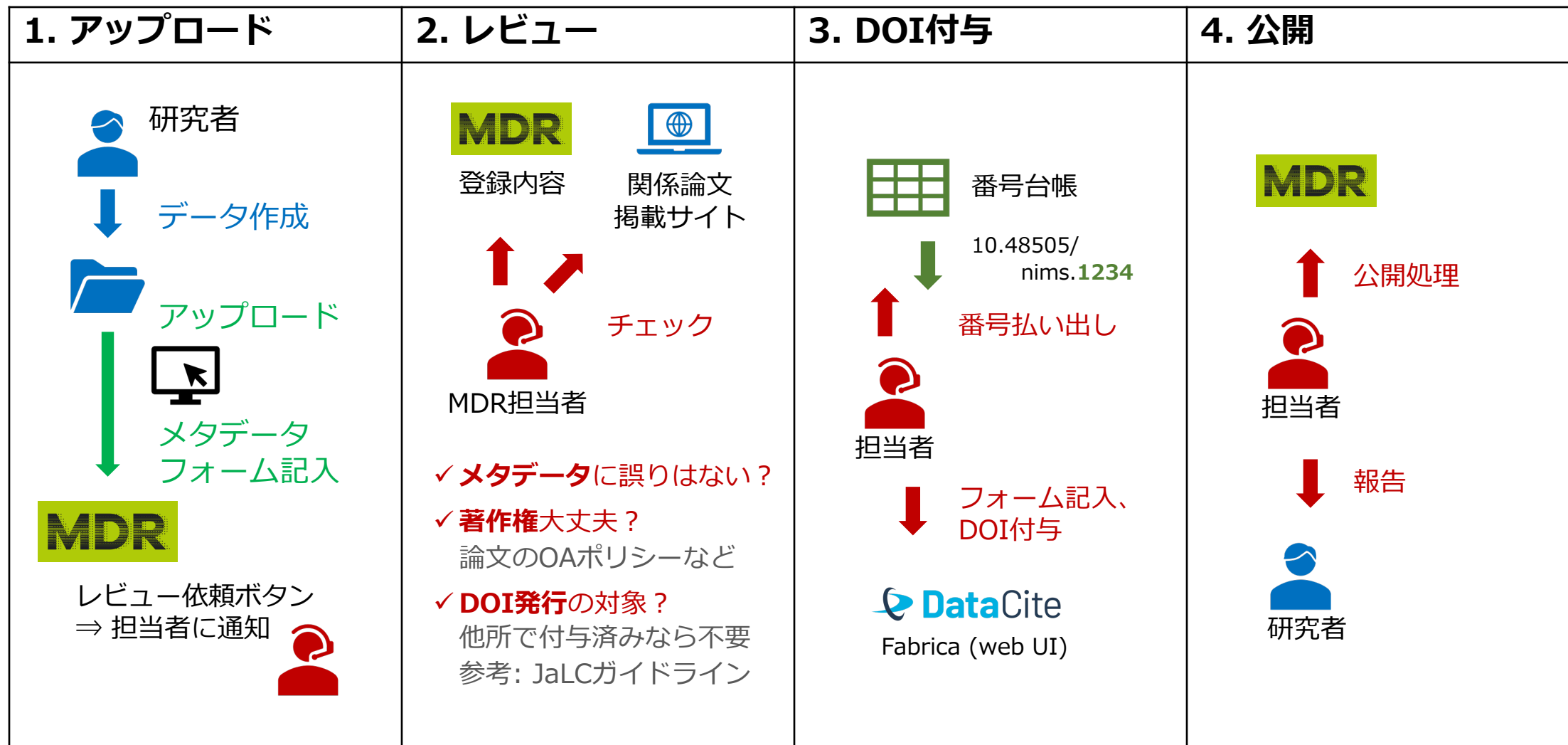
Item

Work

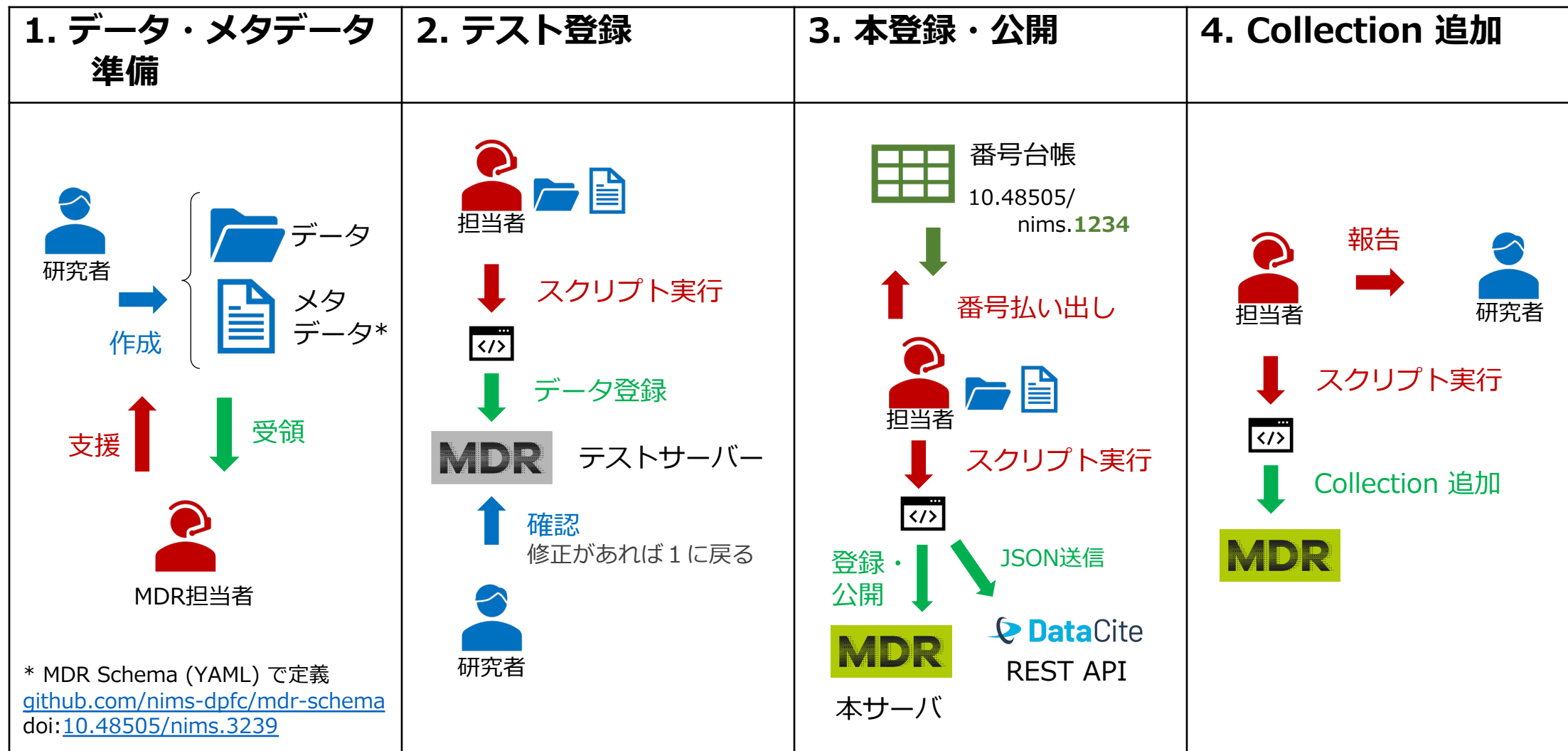
Item

Item

作業フロー 1件ずつ手動登録の場合



作業フロー 多数一括登録の場合



それぞれの課題

• 運用側

- ノーチェックで即時DOI付与を行うリポジトリも存在するが、MDRではメタデータ・公知性・著作権・DOIガイドライン準拠の確認を行うことにしている。
- ただ、現在5～7人体制（兼務）でも登録までに一定の時間がかかっている。スケールアップを予定している中、自動化・省力化できるところを継続的改善中。

• 研究者側（アンケートなどより）

- メタデータをどうすればいいか迷う / メタデータが独特でわかりにくい / そもそもメタデータとは
- 登録するメリットがわかりにくく、手間の方が上回ると感じる
- 権利関係（ライセンス選択）は何がポイントか分からなかった・選ぶものを間違えた

利用者はまだNIMS研究者の一部にとどまり、さらなる普及の余地あり

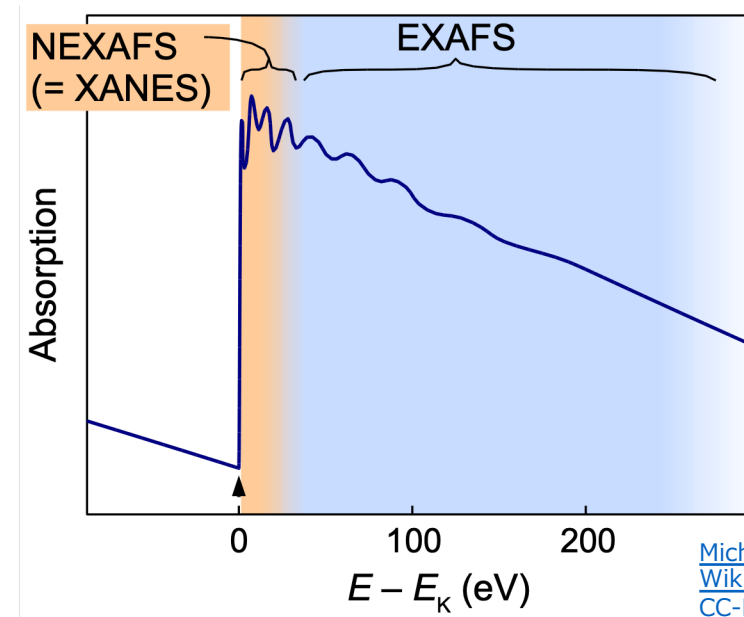
それでも、MDRにデータ登録しDOI付与することに価値を見いだしている事例をご紹介します……

MDR XAFS DB

XAFSとは

物質にX線を当ててどう吸収されるかというデータ（スペクトル）を取得

スペクトルの形状中に **X線吸収微細構造** (XAFS) と呼ばれるものがあり、解析すると元素ごとの情報を得ることができる



[Michael Schmid, Wikimedia Commons](#)
CC-BY 2.5

MDR XAFS DB

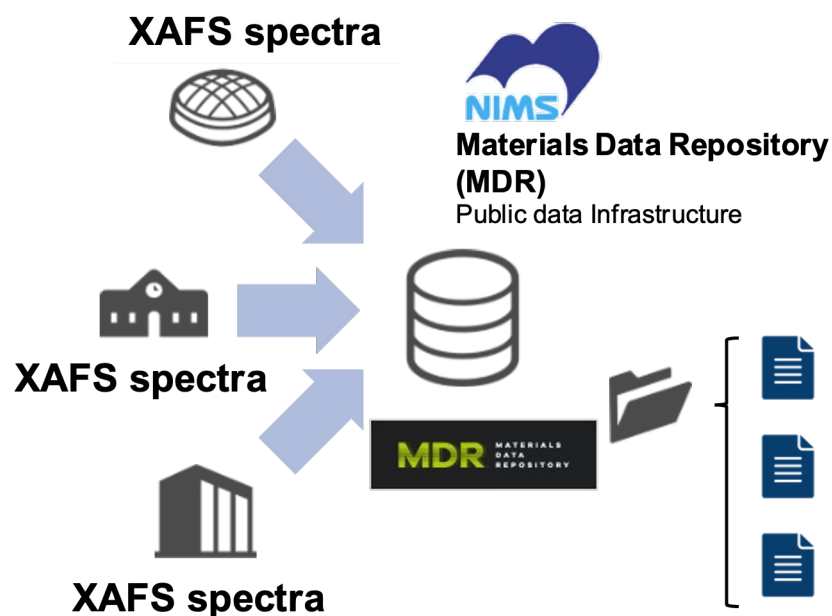
機関連携型データベース

各XAFS関連機関からデータを持ち寄り、
1つの大きなデータベースを作っている

JASRI (高輝度光科学研究センター), 立命館大学, 北海道大学…

2021年第一弾公開

その後もデータ追加 → 現在1757件



ユーザーにとっての利点

- データの永続性
- メタデータを使った横断検索
- CCライセンスで再利用しやすい (BY-NC-SA)
- APIによる検索・ダウンロード
- 各機関のデータを合わせ、1ヶ所で
軽元素 (リチウム) から重元素 (鉛) まで

1 H																	2 He
3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
11 Na	12 Mg											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
55 Cs	56 Ba		72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
87 Fr	88 Ra		104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Ds	111 Rg	112 Cn	113 Nh	114 Fl	115 Mc	116 Lv	117 Ts	118 Og

57	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71
La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
89	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103
Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr

MDR XAFS DB

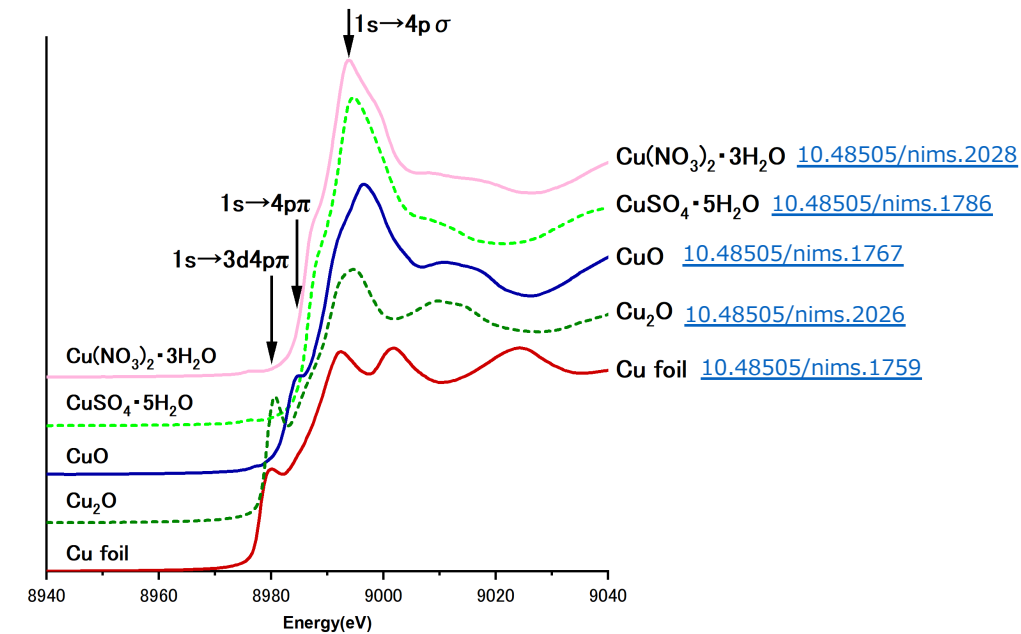
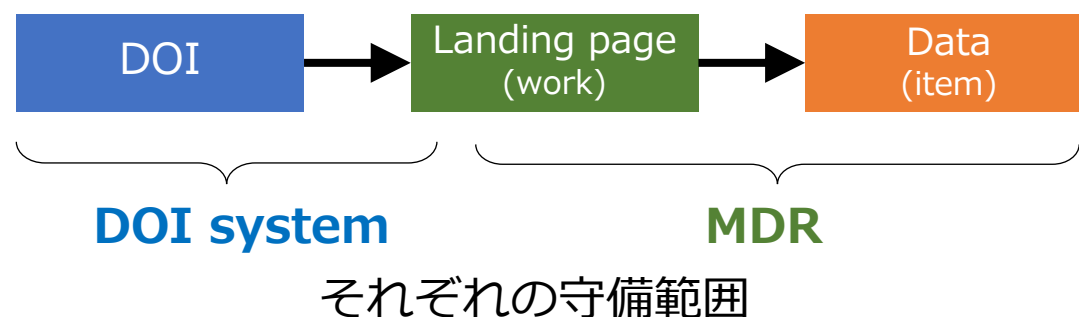
共有の観点で考えたDOIユースケース

比較・参照が容易

他の研究者の解釈の参照→新しい知見

1スペクトル = 1 DOI

DOIの組み合わせでスペクトル図を定義できる

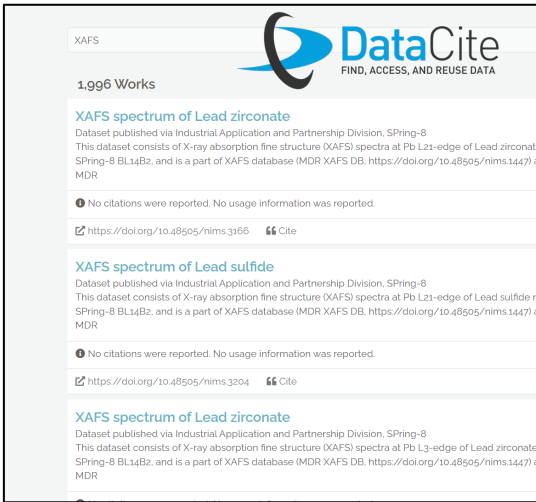


- データのビジビリティ向上
- DOI付データの統合による研究活用
- 公開による新しいDOI付データの創出

MDR XAFS DB

DOIメタデータは汎用的

Resource type, Year, Subject ...
研究者の主な興味対象である
専門的メタデータなどは、
外部サービスが対応するものではない

	Registration Year	
	<input type="checkbox"/> 2022	80
	<input type="checkbox"/> 2021	1,795
	<input type="checkbox"/> 2020	31
	<input type="checkbox"/> 2019	25
	<input type="checkbox"/> 2018	26
	<input type="checkbox"/> 2017	14
	<input type="checkbox"/> 2016	10
	<input type="checkbox"/> 2015	9
	<input type="checkbox"/> 2014	4
	<input type="checkbox"/> 2011	2
	Resource Types	
	<input type="checkbox"/> Dataset	1,790
	<input type="checkbox"/> Text	152
	<input type="checkbox"/> Preprint	21
	<input type="checkbox"/> Collection	10
	<input type="checkbox"/> Other	5
	<input type="checkbox"/> Software	5
	<input type="checkbox"/> Audiovisual	2

専門性はオントロジーとの接続などに期待

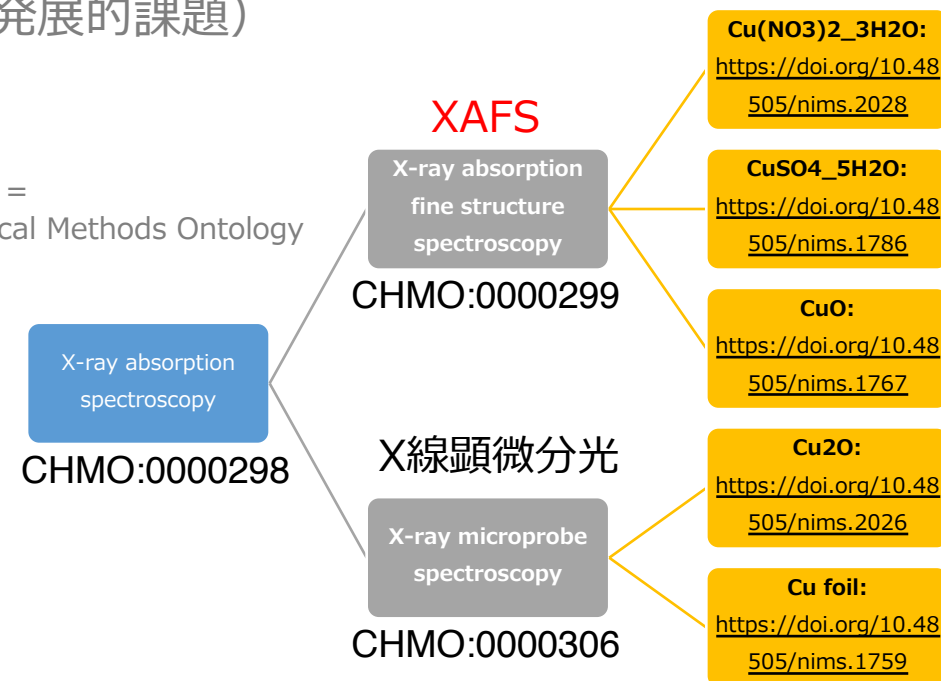
「見つかる・参照できる」から「つながる」へ
専門リポジトリの活躍場所か？

外部専門オントロジーとの接続も視野に

→ このときDOIは安定した識別子として有効
(今後の発展的課題)

Ishii et al.

CHMO =
Chemical Methods Ontology



まとめ

- NIMS MDR の運用実態と大規模登録事例 (MDR XAFS DB) を紹介した。
データへのDOI登録の有益性は明らかでも、実務上の課題は少なくない。
ランディングページとなるリポジトリの機能や運用体制も絡む。
- よくあるハードル：
登録粒度は？ ファイル形式どうする？ メタデータは？
リポジトリ機能はやりたいことに対応している？ 大量作業をどう回す？
- 各データリポジトリ共通の悩みだろうと思うが、
本セッションのような場やRDUF JDARN部会などで意見交換していきたい。



研究データ利活用協議会 ジャパン・データリポジトリ・ネットワーク

