

DataCiteを選んだ理由

Materials Data RepositoryにおけるDataCite DOIの活用

田辺浩介 TANABE.Kosuke@nims.go.jp

物質・材料研究機構

技術開発・共用部門 材料データプラットフォーム データ基盤ユニット 主幹エンジニア

<https://orcid.org/0000-0002-9986-7223>

2023年6月22日 JAPAN OPEN SCIENCE SUMMIT 2023 セッションD3



1. Materials Data Repository (MDR)とは



Materials Data Repository (MDR)



- 物質・材料研究機構(NIMS)が開発・運用するデータリポジトリ
 - <https://mdr.nims.go.jp>
- NIMSの研究成果である論文ファイルや、材料科学に関するデータ（実験・計測データ）を収録
- 2020年6月15日より運用開始
- 2023年6月20時点で、**約1500件のPublication（出版物）**と**約12,700件のDataset（研究データ）**を収録
- NIMSの研究者総覧データベース「SAMURAI」とも連携して動作
 - <https://samurai.nims.go.jp>





Materials Data Repository (MDR)



MDR MATERIALS DATA REPOSITORY

Home About Help Contact Login

Search MDR Enter search terms **GO**

Limit your search

- Type of work ▾
- Dataset ✕ 46
- Collection >
- Keyword >
- Language >
- Resource type >
- Data origin >
- Properties addressed >
- Date published >
- Date updated >
- Creator >
- Author >
- Contact person >
- License >

Filtering by: TYPE OF WORK > DATASET ✕ Start Over

« Previous | 1 - 10 of 46 | Next »

Sort by Relevance | 10 per page | [List View] [Grid View] [Map View]

Data set used for the article Nonequilibrium magnetic response of anisotropic superparamagnetic nanoparticles and possible artifacts in magnetic particle imaging on PLOS ONE



Creator: MAMIYA, Hiroaki
Date published: 08/01/2015
Date Uploaded: 09/06/2020
Date Modified: 15/06/2020
Resource Type: Other

Photographs of deformed areas after fiber fuse ignition



Description: Initial part of damage train left after a fiber fuse initiation.
Creator: TODOROKI, Shin-ichi
Date published: 17/06/2016
Date Modified: 15/06/2020

Fiber fuse propagation (1st trial, overexposed)



Creator: TODOROKI, Shin-ichi
Date published: 22/01/2013
Date Modified: 15/06/2020

Fiber fuse propagation and voids left behind (overexposed)



Creator: TODOROKI, Shin-ichi
Date published: 03/07/2014
Date Modified: 15/06/2020

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



- 大きく分けてDatasetとPublicationの2種類を扱う
- Dataset: 材料データ
 - 実験で使用した数値や画像のデータなどを想定
 - **材料関係のメタデータを記述可能**
- Publication: 論文のデータ
 - 論文ファイル（の著者版）を登録することを想定
 - 一般的な機関リポジトリと同様の運用



[BROWSE ALL PUBLICATIONS](#)



[BROWSE ALL DATASETS](#)

MDR XAFS DB

User Collection

MDR Open



2264 Items · Created by: ISHII, Masashi · Last Updated: 19/06/2023

This collection of data has been compiled at the National Institute for Materials in cooperation of related organizations for the purpose of wide use of X-ray Absorption Fine Structure (XAFS) spectra.

The data published in this collection are publicly known data, and the data providers have guaranteed that the publication of the data does not violate the Copyright Law, the Personal Information Protection Law, or any other laws and regulations by submitting the "Application for Data Publication in the Materials Data Repository (MDR)".

The data providers as of June 2023 are as follows.

- Japan Synchrotron Radiation Research Institute
- Ritsumeikan SR Center
- Hokkaido University, Institute for Catalysis
- Photon Factory, KEK
- Aichi SR, Aichi Synchrotron Radiation Center
- SAGA-LS, Kyushu Synchrotron Light Research Center

The data published in this repository can be used to determine the electronic state and local structure of materials. Please refer to the [readme](#) for file formats and other details. For details of analysis methods, please refer to the many references available.

Information on substances and measurements is compiled from metadata provided by relevant organizations into a format suitable for data linkage on the Data Platform (DPF), and used for display and search. For substances, IDs (Q numbers) are assigned, and the substances are classified and managed in a dictionary. This dictionary can be browsed as "NIMS XAFS DB Project Materials Dictionary" on NIMS's

MDR XAFS DB

国内6組織によるX線吸収微細構造の計測データ集

<https://doi.org/10.48505/nims.1447>

Total items	2264
Size	unknown
Resource type	Dataset
Creator	ISHII, Masashi
Contributor	MATSUDA, Asahiko TANABE, Kosuke NAGAO, Hiroko YOSHIKAWA, Hideki
Keyword	spectroscopy x-ray absorption local structure
License	Creative Commons BY-NC-SA Attribution-NonCommercial-ShareAlike 4.0 International
Publisher	National Institute for Materials Science
Date Created	2021-07-21
Language	English
Identifier	https://doi.org/10.48505/nims.1447
Related URL	https://user.spring8.or.jp/sp8info/?p=2751 https://support.spring8.or.jp/BL/bl14b2/xafs

MDR XAFS DB Readme

MDR Open Deposited

ANALYTICS

CONTENTS << MDR XAFS DB Readme

MDR_XA... edge_his...
Big_spect... edge_his...
edge_K... edge_L...

MDR XAFS DB

MORE INFORMATION

DOWNLOAD THIS WORK (ZIP)

CITATIONS

EXPORT: ▾

In Collection:

MDR XAFS DB

This MDR XAFS DB is an integrated database of XAFS spectral data provided by the participating institutions in this project. The metadata ("local metadata") and data formats used by each institution have many points in common, but there are also differences. This readme summarizes the status of data provided by each institution (2. Statistics), basic

<https://mdr.nims.go.jp/concern/datasets/vh53wz94c?locale=en>

Instruments

Instrument

Title	BL12_XAFS
Description	SAGA-LS Beamline XAFS setup
Instrument function	
Description	x-ray absorption spectroscopy
Manufacturer	
Organization	SAGA-LS

実験・計測データのメタデータ
装置・試料の情報が記録されている

Specimen details

Specimen type

Title	Nickel(II) oxide
Description	on carbon tape

Chemical composition

Description	NiO
Category	http://matvoc.nims.go.jp/entity/Q1631

Structural feature

Description	local structure
Category	http://matvoc.nims.go.jp/entity/Q686

<https://doi.org/10.48505/nims.4192>

Preview: primary.tsv

Show entries

Search:

key

@data_info@data_depositor@organization
@data_info@data_depositor@affiliation
@data_info@data_depositor@name
@data_info@data_depositor@role
@data_info@contact_name@organization
@data_info@contact_name@affiliation
@data_info@contact_name@name
@data_info@contact_name@role
@data_info@access_rights
@data_info@license

value

Kyushu Synchrotron Light Research Center
Beamline Group
Kyushu Synchrotron Light Research Center
Beamline staff
Kyushu Synchrotron Light Research Center
Beamline Group
Kyushu Synchrotron Light Research Center
Beamline staff
open
CC-BY-NC-SA

Showing 1 to 10 of 47 entries

Previous **1** 2 3 4 5 Next

This dataset consists of X-ray absorption fine structure (XAFS) spectra at Ni K-edge of HAVAR mea BL14B2, and is a part of XAFS database (MDR XAFS DB, <https://doi.org/10.48505/nims.1447>) as a c

Description

Alternative title

spring8.2f057cc2-8d9d-4ebd-83dc-e0d054e7cecb

DOI

<https://doi.org/10.48505/nims.2930>

MDRで付与したDataCite DOI

Creator

Name

Industrial Application and Partnership Division

Role

contact person

Keyword

Alloy

BL14B2

HAVAR

Items

Thumbnail	Title	Date Uploaded	Size	Visibility	Actions
	<code>_最終稿版_機械学習による光電子収量分光PYSスペクトルの自動閾値予測200629.pdf</code>	30/06/2020	1.04 MB	MDR Open	SELECT AN ACTION ▾
 論文の著者最終稿ファイル					
	<code>Readme.md</code>	30/06/2020	3.36 KB	MDR Open	SELECT AN ACTION ▾
 論文の付随データファイル					
	<code>requirements.txt</code>	03/07/2020	636 Bytes	MDR Open	SELECT AN ACTION ▾
	<code>pys_mdr.zip</code>	03/07/2020	82.8 MB	MDR Open	SELECT AN ACTION ▾

<https://doi.org/10.48505/nims.1440>



- MDRに登録する論文・データに対して、**DataCite DOI**を付与
- 2023年6月20日時点で、**2872件のDataCite DOI**を付与している
 - 日本の研究機関別付与数では、JAMSTEC（3659件）の次に多い
 - JAXA1059件、DIAS153件、極地研147件、九大115件、環境研64件、京大4件
- DOIの付与対象は研究データ全般と論文著者版
 - Gold OAになっている論文も収録しているが、MDRではDOIは付与しない
 - その他、すでに他の場所でDOIが付与されているデータには付与しない
- NIMSはJaLC経由ではなく、DataCiteの会員になってDataCite DOIを付与している
 - JaLC経由でDataCite DOIを付与する場合、本来DataCiteがサポートしているメタデータ項目や機能が使用できないことがある（後述）



MDRでのDataCite DOIの文献種別ごとの付与状況



resourceType (文献種別)	付与数
Dataset	2677
Journal Article	141
Text	16
Other	14
Collection	10
Software	5
Preprint	4
Conference Paper	2
Book Chapter	1
Book	1
Conference Proceeding	1
Report	1

2. なぜDataCite DOIを付与しているのか



- 研究データのDOIとして広く用いられているから
- **外部データベースへの収録に優位性があるから**
 - OpenAIRE Explore, Data Citation Index, Mendeley Data, Dimensions, Ex Libris Central Discovery Index
<https://support.datacite.org/docs/where-can-i-search-doi-metadata>
- 豊富で使いやすいAPIを備えているから
 - NIMSはJAIRO Cloudを使用していないため、DOIの付与の方法を別途用意する必要があった
- **研究データだけでなく、文献に対するDOIも付与できるから**
 - 論文（著者版）にもDOIを付与したいという要望があった
 - figshareやZenodo, arXivで付与されているDOIはDataCite DOI



DataCiteのresourceType (資料種別、2023年6月時点)



- Audiovisual
- Book
- BookChapter
- Collection
- ComputationalNotebook
- ConferencePaper
- ConferenceProceeding
- DataPaper
- Dataset
- Dissertation
- Event
- Image
- InteractiveResource
- Journal
- JournalArticle
- Model
- OutputManagementPlan
- PeerReview
- PhysicalObject
- Preprint
- Report
- Service
- Software
- Sound
- Standard
- Text
- Workflow
- Other
- (ただし現在のJaLCでは、文献に対するDataCite DOIの付与をサポートしていない)

論文や書籍に加えて、DMPやプレプリント、ソースコードや査読歴など、新しい種別の研究情報にも対応している



- REST・OAI-PMH・GraphQLの各インターフェースが用意されており、いろいろなアプリケーションにに簡単に組み込める
- JaLC APIと異なり、JSONでDOI登録用のメタデータが書ける
 - 以下のようなJSONをPOSTで送信するだけで、DOIが付与できる
 - 実際にはリゾルブ先のURLやタイトル・著者名などが必要

```
{
  "data": {
    "type": "dois",
    "attributes": {
      "doi": "10.5438/0012"
    }
  }
}
```

<https://support.datacite.org/docs/api-create-dois>

- **(ただし現在のJaLCでは、DataCite APIによるDOIの付与をサポートしていない)**



- DataCite DOIが研究データ用のメタデータだからといって、**個別の研究分野の詳細なメタデータが記述できるわけではない**
 - 地理情報（緯度・経度）や「データ収集日」といった項目はある
 - むしろ文献以外にもDOIが付与できるよう、メタデータの記述が簡略化されているとも言える
 - MDRでは、材料科学のメタデータは別途CSV・JSON・YAMLファイルで記述
- DataCite Schema 4.4で、文献のメタデータの項目が大幅に増加した
 - DataCite Schema 4.3までは、文献のメタデータを記述するための項目が少なく、ジャーナル名など論文のメタデータを記述するのに苦労した



```
{
  "data": {
    "type": "dois",
    "attributes": {
      "event": "publish",
      "url": "https://mdr.nims.go.jp/pid/c7c8a33f-e754-4b87-8c4b-49b463e72b54",
      "doi": "10.48505/nims.4192",
      "types": {
        "resourceTypeGeneral": "Dataset"
      },
      "titles": [
        {
          "title": "XAFS spectrum of Nickel(II) oxide"
        }
      ],
      "creators": [
        {
          "name": "SAGA-LS",
          "nameIdentifiers": [

```

タイトルやデータ作成者名など。
研究データそのもののメタデータはほとんど含まれない



試料（複数記述可）

specimens:

- name: A002 #試料の名前

description: NiO polycrystal film サンプル8 #試料の説明

identifier: DCStagid-47910155 #試料のID

chemical_compositions:

- identifier: 'PubChem: 23954' #試料の化学組成に関するID

description: TiCoooo #試料の化学組成の説明・記述

crystallographic_structures:

- category_vocabulary: <https://matvoc.nims.go.jp/wiki/Item:Q556> #試料の結晶構造に関するID

description: (試料の結晶構造の説明・記述)

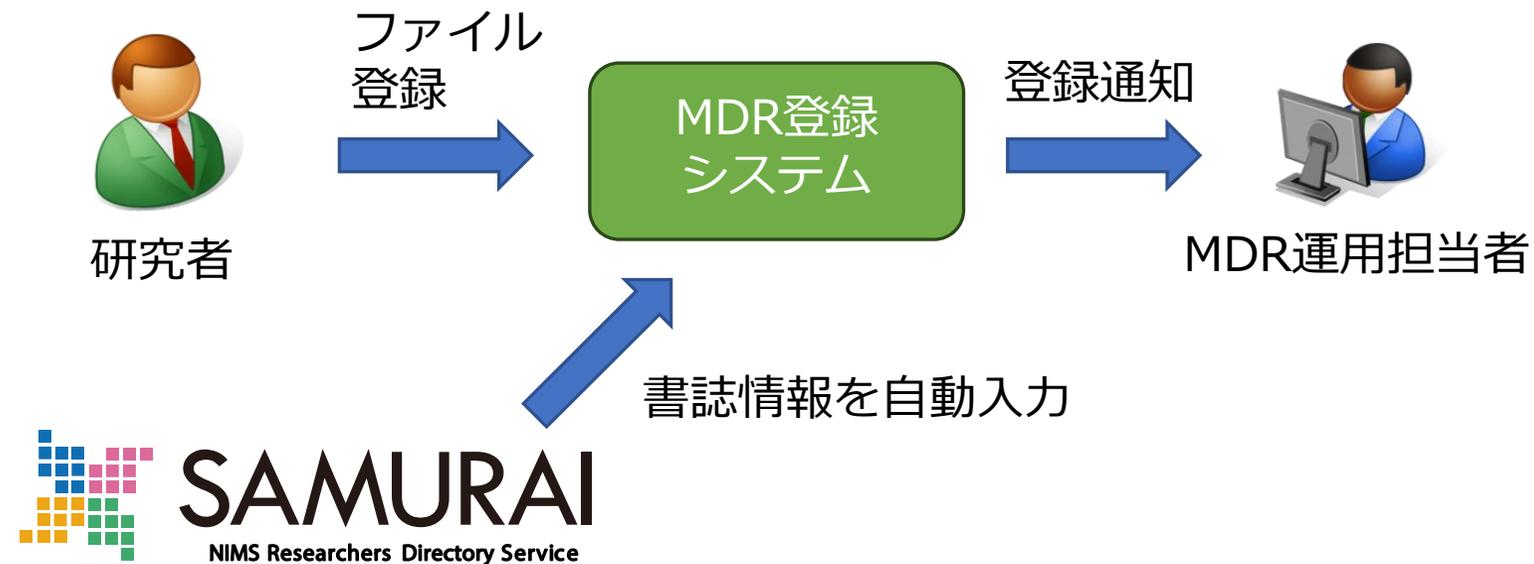
MDR独自のメタデータ。現在のDataCiteでは、これらの研究分野個別のメタデータは扱えないので、CSVやJSON、YAMLなどで別途メタデータを記述する必要がある

3. MDRでのDataCite DOIのワークフロー



1. 研究データファイルの登録

- 研究者は「**MDR登録システム**」（データ登録用の内部アプリケーション）にログインし、MDRに登録するファイルをアップロードする
- 関連URLに論文DOIを入力すると、著者名やタイトルが自動入力される
 - NIMSの研究者総覧「SAMURAI」などの所内データベースから取得
- 研究者がデータを登録すると、MDR担当者に通知が届く





Resource type 資料種別

Required / 入力必須

資料種別

poster

論文ファイルを登録する場合は"article"や"proceeding"、口頭発表のスライドは"presentation"や"poster"、論文の付随データファイルは"dataset"を選択してください。

Creator 著者

Required / 入力必須

氏名

松田 朝彦

論文を登録する場合、論文での著者表記とあわせてください。

ORCID

0000-0001-5989-027X

0000-1111-2222-3333 の形式で入力してください。

所属組織

物質・材料研究機構

著者の所属する組織の名称を入力してください。論文を登録する場合、論文での著者表記とあわせてください。

所属部署

統合型材料開発・情報基盤部門/材料データプラットフォームセンター/データシス:

著者の所属する部署の名称を入力してください。論文を登録する場合、論文での著者表記とあわせてください。

ROR

026v1ze26

役割

author

著者順序

1

[行を削除](#)

タイトルや著者名は、NIMS内のデータベースから自動的に取得して入力される



2. 研究データの公開準備作業とDataCite DOIの付与

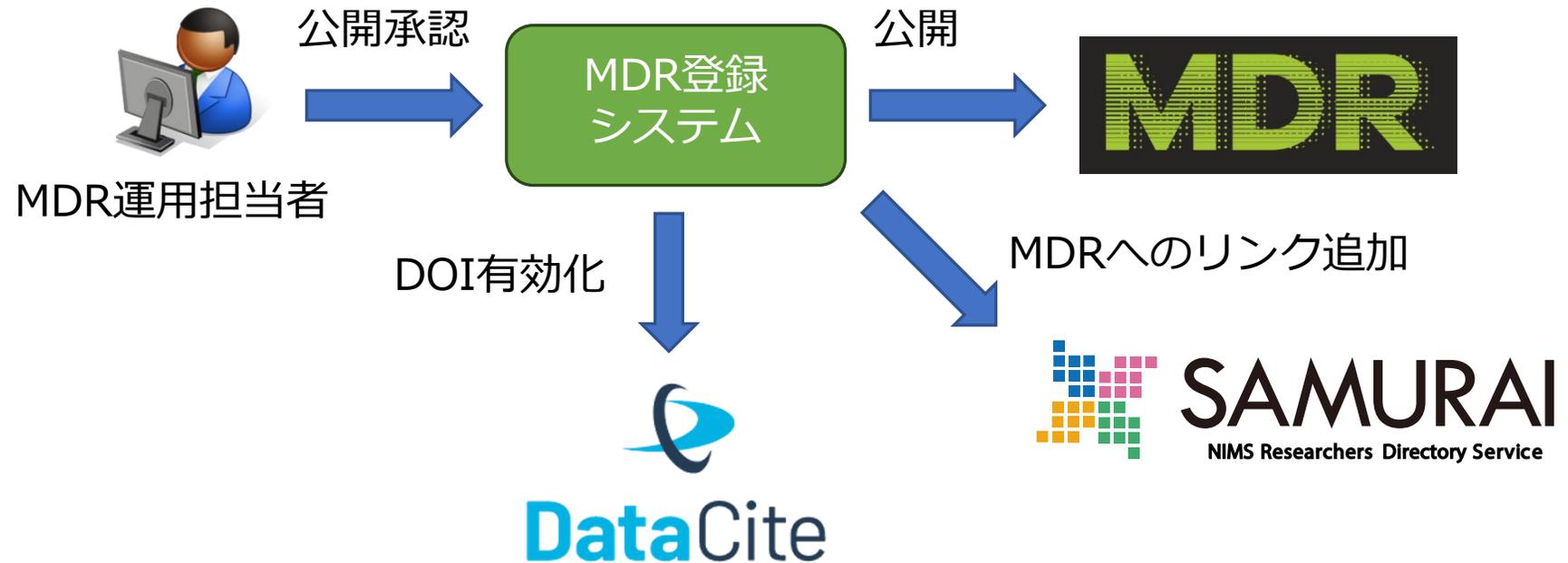
- MDR担当者は登録された書誌事項とファイルをチェックし、公開可否、ならびにDataCite DOIの登録可否を判断する
- DataCite DOIの登録が行える場合、MDR登録画面からDataCite DOIを予約する
 - MDR登録システムがDataCite APIを呼び出す
 - 論文付随データの場合、論文DOIとデータDOIの関連も自動的に作成される
 - 必要に応じて、予約したDOIを研究者に連絡し、執筆中の論文にデータのDOIを記入できるようにする





3. 研究データの公開

- MDR担当者は公開を承認し、DataCite DOIを有効化する
- 公開が承認されたデータは、自動的にMDRに送付されて公開される。
あわせて、SAMURAIにもMDRへのリンクが自動的に追加される





NIMSの研究者総覧SAMURAIとのリンク



SAMURAIの論文詳細ページに、MDRに登録した論文付随データのリンクが追加される

Polarization Dependent Bulk-sensitive Valence Band Photoemission Spectroscopy and Density Functional Theory Calculations: Part I. 3d Transition Metals

著者 [Shigenori Ueda](#), Ikutaro Hamada.

掲載誌名 [Journal of the Physical Society of Japan](#) 86 [12] 124706
ISSN: 13474073, 00319015
ESIでのカテゴリ: [PHYSICS](#)

出版社 [Physical Society of Japan](#)

発表年 2017

言語 English

DOI <https://doi.org/10.7566/jpsj.86.124706>

本文ファイル・データセット

MDR	available	HAXPES spectra for Fe
MDR	available	HAXPES spectra for Co
MDR	available	HAXPES spectra for Zn
MDR	available	HAXPES spectra for Ti
MDR	available	HAXPES spectra for Ni
MDR	available	HAXPES spectra for Cr
MDR	available	HAXPES spectra for V
MDR	available	HAXPES spectra for Mn
MDR	available	HAXPES spectra for Cu

この文献を Mendeleyにインポート

MDR
MATERIALS DATA REPOSITORY

HAXPES spectra for Mn

MDR Open Deposited

ANALYTICS

CONTENTS

Mn_3s.png Mn_2p.png Mn_VB.png

Mn 3s

Intensity (arb. unit)

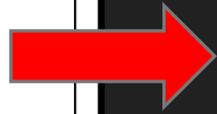
Binding energy (eV)

75

DOWNLOAD THIS WORK (ZIP)

CITATIONS EXPORT

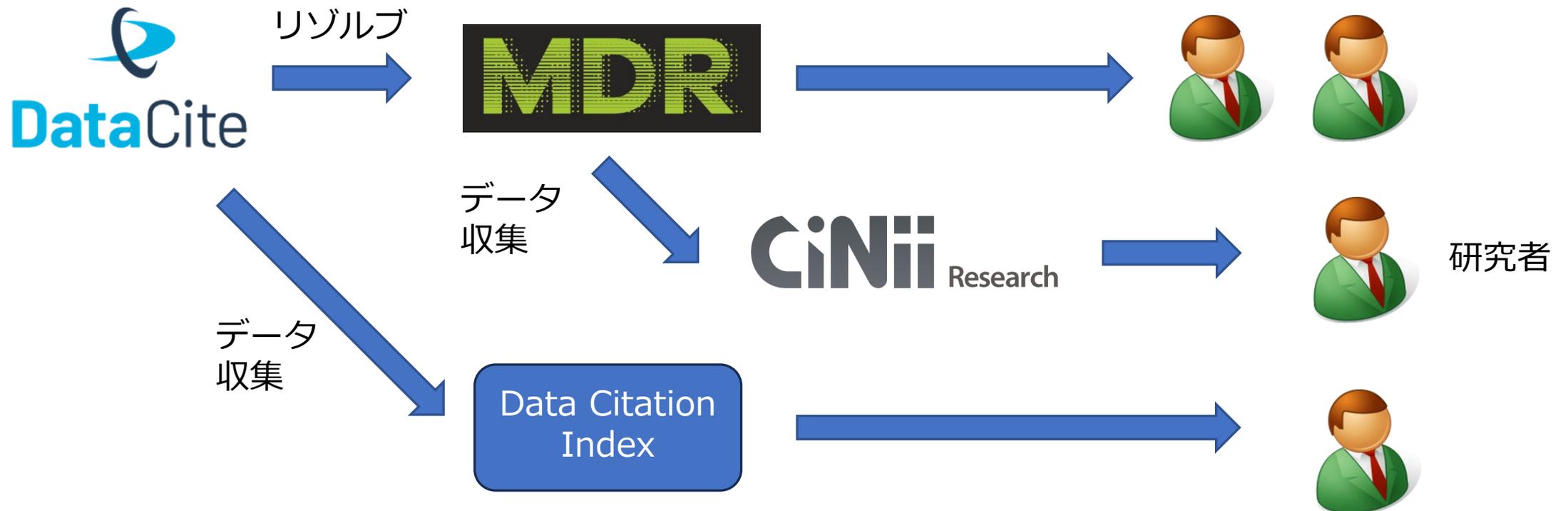
In Collection: HAXPES spectra for elemental solids





4. 研究データの流通

- DataCite DOIはMDRのURLにリゾルブされる
- DataCiteに収録された研究データのメタデータは、DataCite APIを通して、DataCite自身の検索サービスや外部検索データベースに収録され、研究者が検索できるようになる





Q xafs (トピック) 結果の分析 アラートを作成

[クエリリンクをコピー](#)

出版物 推奨記事...

検索結果の絞り込み

トピック内の検索...

マークリストで絞り込み

出版年

- 2022 429
- 2021 1,591
- 2020 23
- 2019 8
- 2018 3

[詳細表示 >](#)

コンテンツタイプ

- Data Set 2,080
- Software 5
- Data Study 3

0/2,088 マークリストに追加 エクスポート

1 **XAFS spectrum of Sulfur**

[Ritsumeikan SR Center](#)
2022 | Materials Data Repository | Data set

This dataset consists of X-ray absorption fine structure (XAFS) spectra at S K-edge of Sulfur measured at Ritsumeikan-SR BL-10, and is a part of XAFS database (MDR XAFS DB, <https://doi.org/10.48505/nims.1447>) as a collection of MDR

[データを表示](#) ...

0 引用文献

2 **XAFS spectrum of Palladium Carbide**

[Asakura, Kiyotaka](#)
2022 | Materials Data Repository | Data set

This dataset consists of X-ray absorption fine structure (XAFS) spectra at Pd K-edge of Palladium Carbide measured at PFAR, and is a part of XAFS database (MDR XAFS DB, <https://doi.org/10.48505/nims.1447>) as a collection of MDR

[データを表示](#) ...

0 引用文献

MDRでDataCite DOIが付与されたデータセットは、Clarivate社のData Citation Indexに収録される

4. MDRでのDataCite DOIの今後の活用予定



- 実験装置・試料へのDOI付与
 - 研究データの検索や追跡のために、「どの実験でどの試料を用いたか」「どの実験でどの装置を用いたか」といった情報を管理する必要が生まれてきている
 - **現在策定中のDataCite Schema 4.5で、resourceTypeにInstrumentが追加**
 - 実験装置のPID付与については、RDAのPersistent Identification of Instruments WGで議論
 - RDUFの「研究資料・実験機器へのPID付与検討小委員会」で、ホワイトペーパーの和訳を作成
<https://pindinst-white-paper.readthedocs.io/ja/latest/>
 - DataCiteでは試料に対するIDとして、**IGSN**(International Generic Sample Number)をサポートしている



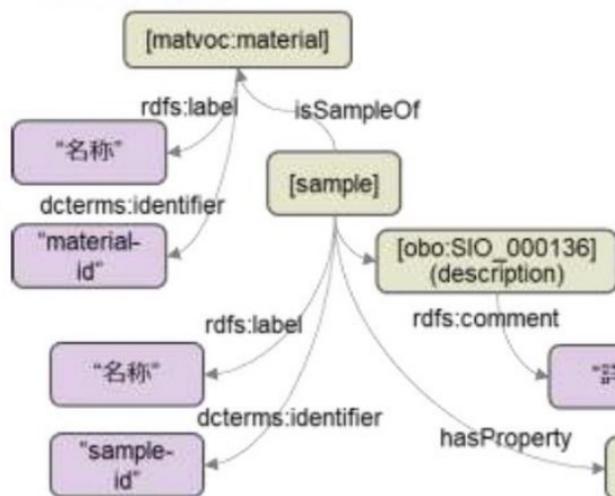
- データ共有・公開を促すためにも、MDRで提供している**データの利用状況**を研究者に示すことは極めて重要
- DataCiteは**COUNTER準拠のデータの利用統計**を提供しており、MDRでもこれを採用したい
- 以前は集計用のログを自前で収集しなければならなかったが、2023年にDataCiteがJavaScriptによるトラッカーのβ版をリリース
 - Google Analyticsのように、HTMLにタグを埋め込むだけで利用統計が取れる
 - <https://support.datacite.org/docs/datacite-usage-tracker>
- ダウンロード数や引用数の表示も、HTMLにタグを埋め込むことで可能
 - 以下が表示例



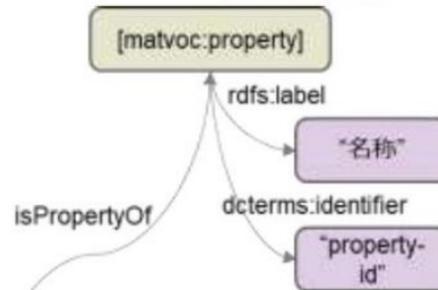
<https://support.datacite.org/docs/displaying-usage-and-citations-in-your-repository>

NIMS DB ←
MatNavi

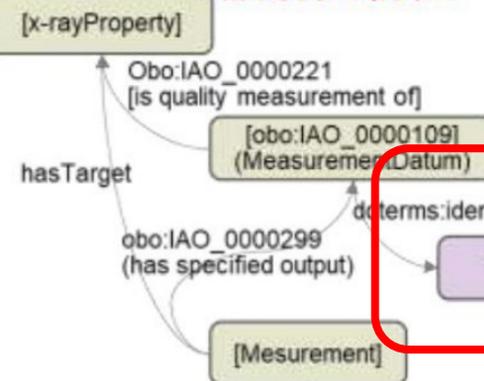
材料辞書



物性辞書



放射光物性



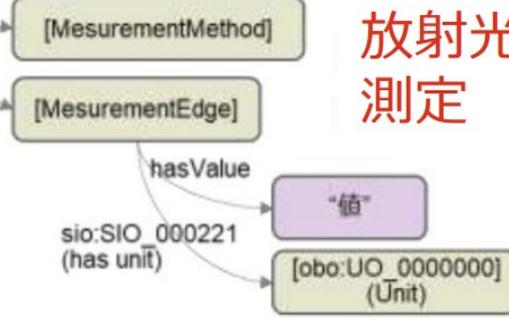
DOIから
材料科学分野の
個別メタデータに
つないでいく

MDR XAFS DB



外部オントロジー ←
X-ray absorption
spectroscopy
(CHMO:0000298)

放射光実験
測定





- **PIDは、複雑なデータの結びつきを解きほぐすための鍵**
- 研究活動も、それに付随するデータ管理も、ほんとうに多様化している
- 論文だけでなく、研究データや実験装置など、さまざまなものにPIDが付与されるようになっている

- DOI、ならびにDOIと連携して動作する他のPIDを通して、複雑で多様化する研究活動が、研究者にもデータ管理者にももっとFAIRなものになるはず

TANABE.Kosuke@nims.go.jp