

まだ見ぬ e-Science、
主役を舞台に載せるためには？

轟 眞市
 物質・材料研究機構
 光材料センター

研究者

Slide 1

背景 機関リポジトリ ⇒ e-Science

OHP

PC

紙媒体雑誌

図書館員

電子媒体論文

?

材料科学者

電子データ

Slide 3

背景 新技術の普及には時間がかかる

'87 ソフトウェア誕生	PowerPoint ver.1
'94 ハードウェア発売	液晶プロジェクタ (EPSON)
'01 講演者初導入	Adobe Acrobat
'05 応用物理学会全面導入	

OHP

PC

Slide 2

背景 e-Science: 2つの形態

観測データ

遺伝子データ

天文学者

遺伝学者

専用データベース

Top down

?

材料科学者

電子データ

Bottom up

紙媒体雑誌

図書館員

電子媒体論文

Self-archiving

Slide 4

内容

まだ見ぬ e-Science、主役を舞台に載せるためには？

予測される声

主役は何に引っかかりを感じているのか？

演者の既視感

こんな話、前にも考えたことがあるぞ！

解決する方策

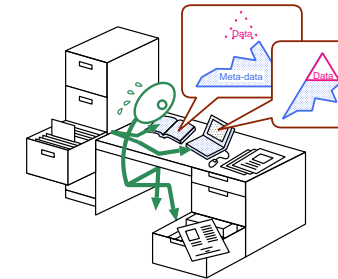
デジタルライブラリは解を出せるのか？

Slide 5

予測される声

人が去ってデータは死ぬ

- 学生やポストクが残した記録
- ⇒ コンテキストも記録されていなければただのゴミ
- ⇒ 実験ノート of 解読と突合せ作業

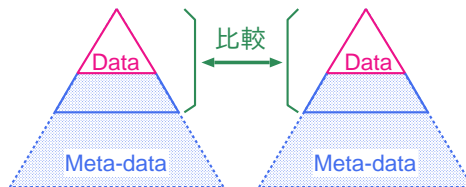


Slide 7

予測される声

データを公開する必要はあるの？

- コンテキストあつての実験データ
- 開示無用のコンテキストは論文に載らない
- ⇒ 比較するだけならコンテキストの差分のみで充分
- ⇒ 知的財産保護・競争力の確保
- 開示方針設定は研究者の専権事項



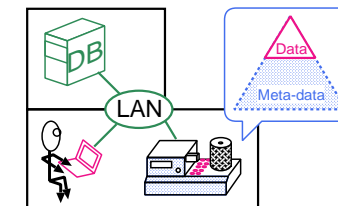
参考:
DRFtech-Kyoto
(*09/9/7)

Slide 6

予測される声

記録媒体: HDD/PC ⇒ XML/DB

- コンテキストを一々全部記録するのは面倒
- データが手元に無いと不安
- 今使っているデータ処理ソフトウェアが使えない？



Slide 8

内容

まだ見ぬ e-Science、主役を舞台に載せるためには？

予測される声

閉じた運用は便利かもしれないが、面倒くさそう

演者の既視感

こんな話、前にも考えたことがあるぞ！

解決する方策

デジタルライブラリは解を出せるのか？

Slide 9

演者の既視感

構築例

図表3 XMLを介したマテリアルインフォマティクス構築の例

出典: 知京 豊裕、無機材料研究におけるマテリアルインフォマティクスの動向、科学技術動向、2006年1月号
Lippmaa 助教授による資料を参考に作成

Slide 11

演者の既視感

マテリアル・インフォマティクス

- 2004年に提唱 by コンビナトリアル材料科学技術P

- 並列合成試料の並列評価で生産されるデータの解析
 - ⇒ XMLの流通をプロジェクト内で閉じて運用(東大)
 - ⇒ Object指向言語による多次元データ処理(演者)

Slide 10

演者の既視感

仮想試料ライブラリ

Ruby オブジェクト

```

Virtual Sample Library
v1 = Tk5vlib.new( "191316s.rpg", "gb0607.rb", "191449c.rpg" )
Code: v1[41]["Fluorescence spectrum"]("wavelength (nm)")
Class: [Array]
Value: [ 893.94, 896.8, 899.66, 902.52, 905.38, 908.24, 911.1, 913.96, 916.83, ... ]
40 41 42 43 44 45 46 47 48 49 50 51 52 53 54 55 56 57 58 59 60 Methods
Appearance
Fluorescence spectrum Intensity (a.u.)
Fluorescence/Time Wavelength (nm)
Heat Treatment
Lifetime/Wavelength
    
```

Slide 12

演者の既視感 材料科学における e-Science

コンピナトリアル 材料科学

Materials Informatics

Top-down

CLOSE ← OPEN

Bottom-up

e-Science

←アクセス制御→

- オープンな規格で構築
- 専門領域に依らない

Slide 13

内容

まだ見ぬ e-Science、主役を舞台に載せるためには？

予測される声

閉じた運用は便利かもしれないが、面倒くさそう

演者の既視感

古くて新しい問題をオープンなプラットフォームで解決

解決する方策

デジタルライブラリは解を出せるのか？

Slide 15

演者の既視感 コンビプロジェクトで学んだこと

- ポケットひとつの原則

Lab. LAN Office Internet Mobile Home Dropbox ZumoDrive

- 実験データのトレーサビリティ確保

実験装置

生データ

文書

グラフ

追跡

(1) どう保存するか？

(2) どう作るか？

(3) どう埋め込むか？

⇒ 汝のディスクを 闇で満たすな

Slide 14

解決する方策 記録媒体: HDD/PC ⇒ XML/DB

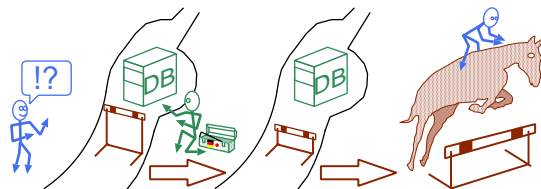
Fedora Commons DB LAN Office Internet Home Firewall

- FedoraFS: XML/DB の中身を HDD の様に見せる
- ⇒ 直感的ユーザインタフェース
- ⇒ 既存のデータ処理ソフトウェアが使える

Slide 16

解決する方策**人が去ってデータは死ぬ**

- 使いやすいシステムに育てることに関与すべし



Slide 17

結論

まだ見ぬ e-Science、主役を舞台に載せるためには？

予測される声

閉じた運用は便利かもしれないが、面倒くさそう

演者の既視感

古くて新しい問題をオープンなプラットフォームで解決

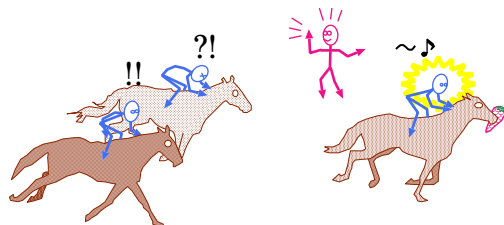
解決する方策

セルフアーカイブの啓蒙と同様、育て使い広めるべし

Slide 19

解決する方策**データを公開する必要があるの？**

- オープンアクセス文化の成熟を待つべし
⇒ 「文献の引用」から「データへのリンク」へ
- 成功例の掘り起こしと啓蒙



Slide 18

参考文献**1. 予測される声, 3. 解決する方策**

1. DRFtech-Kyoto,
<http://drf.lib.hokudai.ac.jp/drf/index.php?DRFtech-Kyoto>
2. 轟 眞市, 小西智也, 井上悟: “ブログを基にした実験ノート: 個人の研究活動を効率化する情報環境”, *Appl. Surface Sci.*, **252** [7], pp. 2640-2645 (2006) の和訳.
<http://pubman.mpg.de/pubman/item/escidoc:33128>
3. FerodaFS,
<https://techknowhow.library.emory.edu/node/18>

Slide 20

参考文献

2. 演者の既視感

4. 轟 眞市：“研究生活のためのインフォマティクス (連載全3回)”, マテリアルインテグレーション, **21**, 10～12月号 (2008).
<http://pubman.mpd.l.mpg.de/pubman/item/escidoc:39111>
5. 鯉沼秀臣, 川崎雅司 (編)、コンビナトリアルテクノロジー—明日を開く ‘もの作り’ の新世界 (2004), 丸善.
6. S. Todoroki: “Object-oriented virtual sample library: a container of multi-dimensional data for acquisition, visualization and sharing”, *Meas. Sci. Technol.*, **16** [1], pp. 285-291 (2005).