

メタデータ技術に基づいた 研究データ知識化の実現

理化学研究所 情報統合本部 基盤研究開発部門

小林 紀郎

和光

- ・最先端研究プラットフォーム連携(TRIP)事業本部
- ・開拓研究所
- ・数理創造研究センター
- ・計算科学研究センター
- ・量子コンピュータ研究センター
- ・情報統合本部
- ・脳神経科学研究センター
- ・環境資源科学研究センター
- ・創発物性科学研究センター
- ・光量子工学研究センター
- ・仁科加速器科学研究センター
- ・放射光科学研究センター



量子コンピュータ



重イオンビーム

けいはんな

- ・バイオリソース研究センター
- ・革新的知能統合研究センター
- ・情報統合本部

播磨

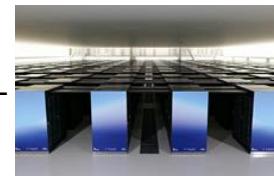
- ・放射光科学研究センター



放射光施設

神戸

- ・生命機能科学研究センター
- ・数理創造研究センター
- ・開拓研究所
- ・計算科学研究センター



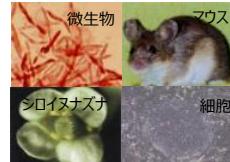
スパコン「富岳」

仙台

- ・光量子工学研究センター

筑波

- ・バイオリソース研究センター
- ・環境資源科学研究センター



バイオリソース

東京

- ・革新的知能統合研究センター
- ・数理創造研究センター
- ・計算科学研究センター



横浜

- ・開拓研究所
- ・数理創造研究センター
- ・計算科学研究センター
- ・生命医科学研究センター
- ・環境資源科学研究センター

クライオ
電子顕微鏡

TRIP 事業

- ・統合データ・計算科学プログラム
- ・科学研究基盤モデル開発プログラム
- ・基礎量子科学研究プログラム
- ・創薬・医療技術基盤プログラム
- ・先端半導体科学プログラム
- ・理研産業協創プログラム
- ・バトンツーン研究推進プログラム

物理科学領域

- ・創発物性科学研究センター
- ・光量子工学研究センター
- ・仁科加速器科学研究センター
- ・放射光科学研究センター

物理科学

環境科学領域

- ・環境資源科学研究センター
(バイオリソース研究センター)

環境科学

開拓科学領域

- ・開拓研究所

数理・計算・情報科学領域

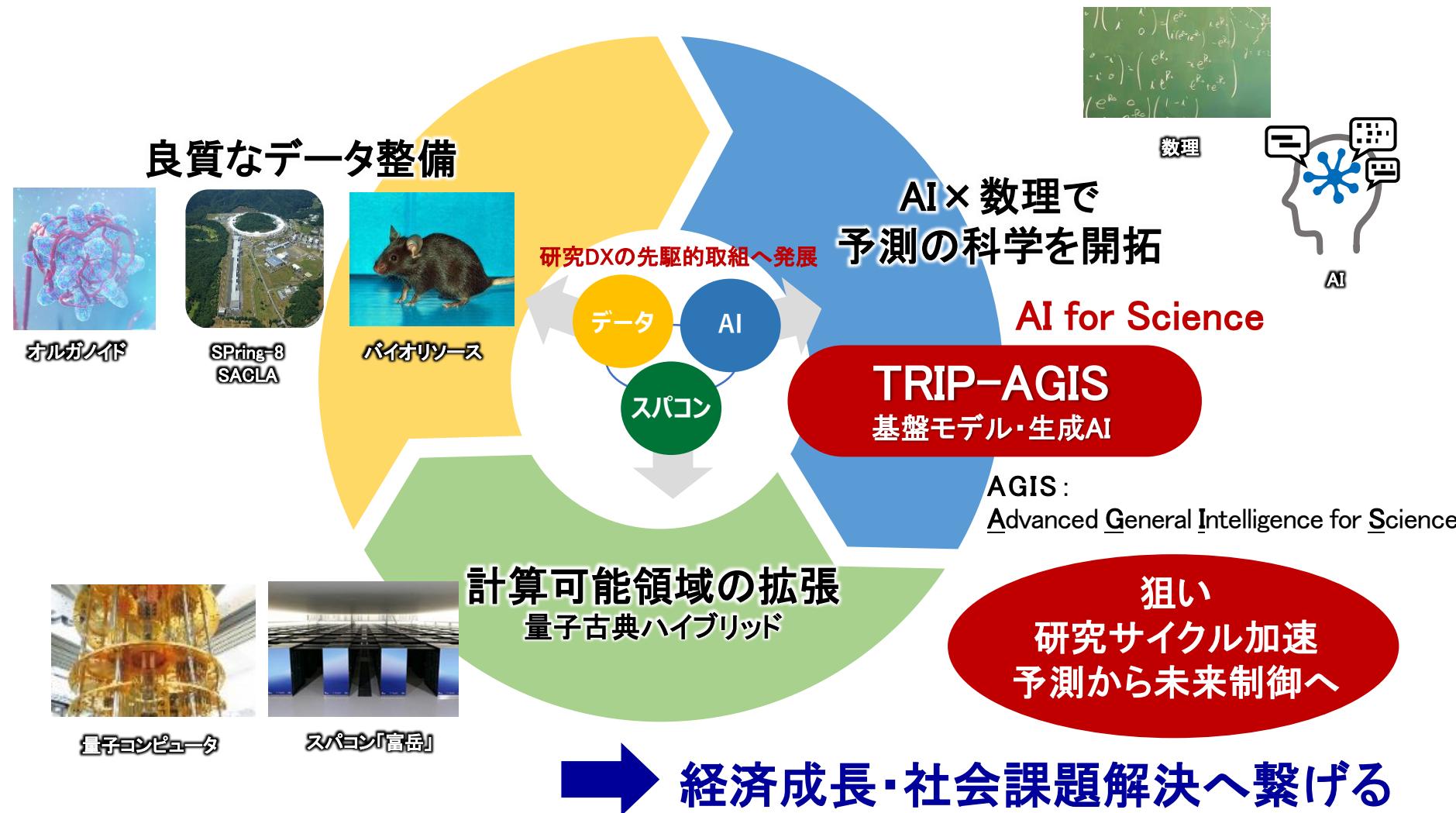
- ・数理創造研究センター
- ・計算科学研究センター
- ・量子コンピュータ研究センター
- ・革新知能統合研究センター
- ・情報統合本部

生命科学領域

- ・生命医科学研究センター
- ・生命機能科学研究センター
- ・脳神経科学研究センター
- ・バイオリソース研究センター



Transformative Research Innovation Platform of RIKEN platforms
データ・予測アルゴリズム・先端計算による科学研究の革新



良質なデータとは

研究データのライフサイクルにおける次の利用者が、
推測に頼らず、
メタデータとして明示された情報を読むことで、
データの理解と再利用に必要な事項を確認できるデータ

研究データのライフサイクル

- 計画
- 生成
- 集約
- 解析／統合
- 共有／公開
- 保存／廃棄

メタデータと知識化

メタデータ

- データ生成の背景やデータの意味(語彙／概念)を記述する情報



知識化

- スキーマと語彙(オントロジ)の厳密な定義と共有により、統語的(構造)および意味的相互運用性を担保
- 機械処理を前提とした形式で実装、AIとの接続を可能とする
- 目的または課題に対応できるように、既存のメタデータとオントロジーを体系的に集約・整理・構造化し、得られる知見(知識グラフ)を利用可能な形で扱う

良質なデータとは

研究データのライフサイクルにおける次の利用者が、推測に頼らず、
メタデータとして明示された情報を読むことで、データの理解と再利用
に必要な事項を確認できるデータ

研究データのライフサイクル

- 計画 データ管理計画(DMP)
- 生成 市販メー力製計測機器
- 集約 研究情報管理基盤・データリポジトリの整備
- 解析／統合
- 共有／公開 FAIR原則に基づいた公開・公共リポジトリへの登録
- 保存／廃棄



公開に用いるメタデータから
遡って
研究メタデータを考える

+

AIの支援を得て、メタデータ管理
を低成本で実現したい

生命科学共通メタデータスキーマの抽出

生命科学の国際リポジトリ・コンソーシアム・公共リポジトリのメタデータを比較して
生命科学研究の最小限のメタデータスキーマを抽出

次世代シーケンサー



顕微鏡イメージング



メタボローム(代謝物)



プロジェクト

- ・ プロジェクトID
- ・ タイトル
- ・ 説明
- ・ 作成者
- ・ 作成者
- ・ 研究責任者
- ・ 連絡窓口
- ・ 参考文献
- ・ 実験

実験

- ・ 実験ID
- ・ タイトル
- ・ 説明
- ・ 測定の種類
- ・ 技術の種類
- ・ 測定基盤
- ・ 参考文献
- ・ 実験日
- ・ 実験者
- ・ 実験設計
- ・ 測定
- ・ データ解析

測定

- ・ サンプル
- ・ 測定条件
- ・ データセット
- ・ 計測日時
- ・ 説明

データセット

- ・ フォルダ
- ・ ファイル
- ・ 圧縮ファイル

測定条件

- ・ 機器
- ・ 機器生成メタデータファイル

機器

- ・ 機器ID
- ・ 機器名
- ・ 所在地
- ・ 管理者

データ解析

- ・ 前処理
- ・ 統計的データ解析
- ・ 単変量解析
- ・ 多変量解析
- ・ アノテーション方法
- ・ 可視化
- ・ 解析結果データセット

サンプル

- ・ サンプルID
- ・ 名称
- ・ 説明
- ・ 化合物
- ・ 生物サンプル
- ・ サンプル調整

サンプル調整

- ・ 処理法
- ・ サンプル量
- ・ サンプル抽出プロトコル
- ・ 抽出法
- ・ 標準化合物

生命科学実験研究メタデータを「共用機器測定メタデータ用」に整理

大阪大学 コアファシリティ機構 古谷 浩志先生よりご提供

測定基本情報

- ・測定者
- ・計測日時
- ・サンプル
- ・測定条件
- ・データセット
- ・説明

共用
必須

機器

- ・機器ID
- ・機器名
- ・所在地
- ・管理者

共用
必須

測定条件

- ・機器
- ・測定条件
- ・機器生成メタデータファイル

共用
必須

①測定直後に最低限
必ず記入すべき項目

サンプル

- ・サンプルID
- ・名称
- ・説明
- ・化合物
- ・生物サンプル
- ・サンプル調整

一部
必要

データセット

- ・フォルダ
- ・ファイル
- ・圧縮ファイル

一部
必要

プロジェクト

- ・プロジェクトID
- ・タイトル
- ・説明
- ・作成者
- ・作成者
- ・研究責任者
- ・連絡窓口
- ・参考文献
- ・実験

サンプル調整

- ・処理法
- ・サンプル量
- ・サンプル抽出プロトコル
- ・抽出法
- ・標準化合物

実験

- ・実験ID
- ・タイトル
- ・説明
- ・測定の種類
- ・技術の種類
- ・測定基盤
- ・参考文献
- ・実験日
- ・実験者
- ・実験設計
- ・測定
- ・データ解析

データ解析

- ・前処理
- ・統計的データ解析
- ・单变量解析
- ・多变量解析
- ・アノテーション方法
- ・可視化
- ・解析結果データセット

③研究進捗に応じて
追記する項目

④論文発表等公表の際に
添付すべき項目

追加

②測定データの
重要性に応じて
徐々に追記する項目

⑤当該「共用機器タイプ」
に特有の追加詳細情報
(メタデータ)

理研メタデータベース

<https://metadb.riken.jp>

- 生命科学系の、理研が生成した知識グラフ（メタデータ）を中心に集約、統合、公開
- 研究者には扱いにくいグラフ構造を、表形式等のわかりやすい方法で表示

32の公共オントロジによるデータ記述
57の理研DBと74の外部DBを統合
(**計 131DB**)

国内外の研究コミュニティで活用



概念数	3,991,818
トリプル数	1,449,155,342
関係数	11,779
月ユーザ数	6,315
月アクセス数	1,024,244

理研メタデータベースチャットの開発

MetaDB Chat

What cell lines are associated with cancer

Select a database

xsearch_cell

Chat History

Clear Chat History

Example questions:

- What cell lines are associated with cancer
- Which cell lines are characterized as stem cells?
- Which cell lines are suitable for immunology research?
- Which cell lines are suitable for neuroscience and cancer?

Provide Feedback

[English Feedback Form](#)

[Japanese Feedback Form](#)

ユーザプロンプト

SPARQL Query

PREFIX ns1: <http://metadb.riken.jp/db/rikenbrc_cell/>
PREFIX rdf: <http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#>
PREFIX rdfs: <http://www.w3.org/2000/01/rdf-schema#>
...

Show full SPARQL query

Turtle Triples

@prefix ns1: <http://metadb.riken.jp/db/rikenbrc_cell/> .
@prefix owl: <http://www.w3.org/2002/07/owl#> .
@prefix rdf: <http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#> .
...

Show full Turtle Triples

SPARQL Results

?cell
http://metadb.riken.jp/db/rikenbrc_cell/cell_RCB0307
http://metadb.riken.jp/db/rikenbrc_cell/cell_RCB3710
http://metadb.riken.jp/db/rikenbrc_cell/cell_RCB3711

Show all SPARQL results

Answer

The following cell lines are associated with cancer:

- cell_RCB0307
- cell_RCB3710
- cell_RCB3711
- cell_RCB3712

メタデータ発見

結果を整理・表示

<https://metadb.riken.jp/chat/>

自然言語の質問をSPARQLに自動変換して、
メタデータを検索

生命科学公開メタデータ(RIKEN MetaDatabase)を用いて
大規模言語モデル(LLM)による検索枠組みを試作・検証し、その
成果を実際のデータ管理基盤における研究データ検索へと展
開できる要素技術を確立する。



今後の展開

- メタデータの自動生成に応用
- 構造化されていないメタデータを許容するデータ検索
- 論文・文献と組み合わせたメタデータ検索・抽出

メタデータ設計・評価システム

メタデータ定義には、統制語彙の利用や構造化においてメタデータの専門知識が必要であるが、組織や職制(立場)を超えて、複数人で協力してメタデータを設計できるウェブツールを整備して課題解決を試る。

プロトタイプ版を公開中 <https://metadb.riken.jp/metadataDesign/>

大学・研究機関向けの認証「学認」に対応し、全国の大学・研究機関等で利用可

システム上でプロジェクトを作成し、プロジェクト内で共同作業

研究者



データの深い理解
スキーマ基本設計

図書館員、RA



データ流通・検索の知見
標準メタデータとの関連づけ

メタデータ専門家
(情報)



メタデータ技術
オントロジー・既存スキーマを
利用した意味情報の付与

ユーザフィードバックを得て、特にGUIの改良を進めている

メタデータ設計・評価システムの実装

Meta-data Toolkit

① ユーザ管理



② プロジェクト
作成・管理

③ スキーマ
編集・管理・承認・公開

① ユーザ管理

② プロジェクト作成・管理

③ スキーマ編集・管理・承認・公開

既存のスキーマの取り込み

参加ユーザ

編集
↓
承認
↓
公開
フロー管理

承認者

スキーマ可視化

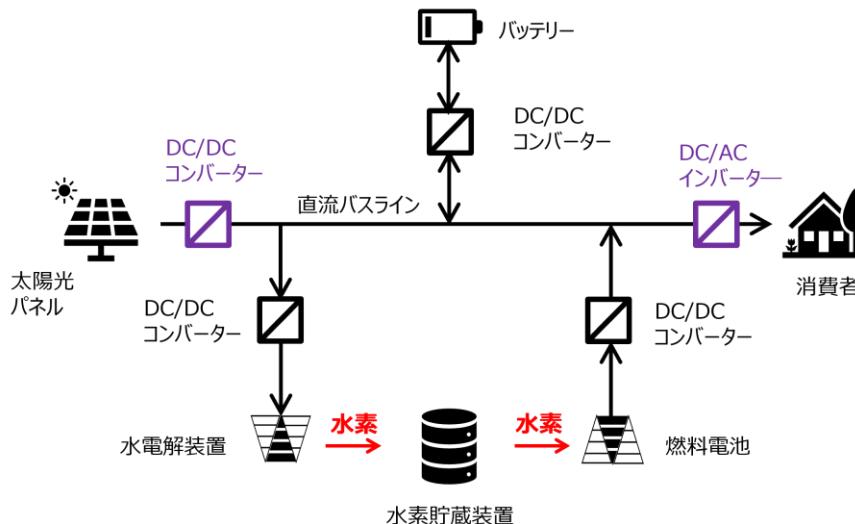
③ スキーマ編集・管理・承認・公開

クラス(概念)

プロパティ(関係と値)

承認者

分散型水素エネルギー・システム



[1] D. Yamashita, et al., Int. J. Hydrogen Energy 44 (2019) 27542.
[2] K. Tsuno et al., IFAC PapersOnLine 56-2 (2023) 9098.



高度な知識AI基盤を備えたエネルギー・システム

集約された知識をAI・シミュレータで利用



分散型水素エネルギーシステムでの知識化

多種多様なデータをメタデータで体系化して制御や予測に活用

