

# 地球惑星試料デポジトリ DREAM の構想と現状

北川宙, 谷内勇介, 国広卓也, 中村栄三

## Depository for references of earth and analytical materials : its concept and status on 2013

Hiroshi Kitagawa, Yusuke Yachi, Tak Kunihiro, and Eizo Nakamura

平成 25 年 11 月 27 日

### Abstract

Institute for Study of the Earth's Interior, Okayama University is constructing DREAM (Depository for references of earth and analytical materials). As a core of the depository, software dedicated for analytical laboratories to guarantee traceability and accessibility of rocks with their geochemical properties has been developed. The software documents the sample origin, current sample location, the location of any sample sub-sets (e.g. thin section, solution, etc.) as well as archives all associated geochemical datasets. In this article, concept and status of DREAM is described.

### 概要

岡山大学地球物質科学研究センターでは、岩石試料を分析データとともに将来引き継ぐべく、地球惑星試料デポジトリ DREAM を構築中である。分析実験室で変化を続ける物質の保守の結果、試料の親子関係と格納場所を追跡することが物質管理における重要二要素であるとの認識に至る。この二要素を追跡し試料とデータを紐付ける専用データベースシステムの開発を行った。DREAM はこのシステムを用いて恒常的に運用されており、現在 12,000 試料の形態、採取場所、現保管場所のみならず、薄片や分解溶液といった子試料の所在、そして試料の化学組成データ追跡している。本稿では DREAM の構想と現状について述べる。

### 1. 構想

サンプルリターン試料を地上で分析する際、探査機搭載装置のような制約を受けない、そして物質が存在する限り、最先端の分析技術を適用できる。これまでに人類はアポロ、ルナ、ジェネシス (1)、スターダスト (2)、そしてはやぶサ (3) といったサンプルリターンミッションを遂行した。ジェネシスは太陽系の平均酸素同位体組成決定を第一目標にかかげ、実験室における分析装置 MegaSIMS 開発をミッション中核に位置付けた。太陽風が埋めこまれた試料が予想外の手順で地球に帰還した時、分析装置はまだ完成していなかった。しかし先に述べたよう、サンプルリターン試料は、汚染対策のされた環境で保管されている限り、分析の時期を問わない。三年後に分析が行われ、太陽系の平均同位体組成が“隕石に観察される異常と認識していたものであること”が判明する。惑星こそが太陽から進化した異端的存在であり、人類はガリレイ・ガリレオから再び学ぶこととなった (4)。岡山大学地球物質科学研究センターは、物質分析を基軸として地球・惑星の起源、進化およびダイナミクスに関する先進的かつ実証的な研究を行っている。総合的地球化学分析と年代測定技術により、46 億年におよぶ地球を含む惑星の歴史を紐解き理解する上で、最も基本となる物理化学的情報を提供する、というのがスタンスである。本センターは、先進的地球惑星物質科学を展開すると同時に、そこで用いた重要な物質科学的試料 (岩石、薄片、パウダー等の形態を持つ地球試料や隕石試料) と公表されたデータを、統一のプロトコルによって管理し、世界の研究者に供することで学問の体系化と継承を実現することを目指すこととした。着実な教育研究成果の積み重ねによって、それを国際的に還元し社会的な「知」のニーズに答えることは学術研究の責務であって、その継続発展を可能とする体制が確立することの意義は極めて大きい。地球惑星試料デポジトリ (DREAM : Depository for

the Reference Earth and Analytical Materials) は、単なる博物学的な収集にとどまらず、学術的に価値の高いデータが付随した物質試料をデータベース化して保管し、将来の研究課題に役立てるとともに共同研究に供することを目的とする。地球惑星物質のみならず、病態生理関連物質等にもその運用を拡張し、これが機能することによって全学的な取り組みへ、さらには大学組織を超えた共通の物質科学デポジトリへと発展することも期待できよう。さてこのようなデポジトリに格納された物質を将来の研究課題において再分析するにあたり、相応量と出版された分析データが残されているだけでは不十分である。それまでに獲得された分析データに加え、試料の生い立ちや加工状況、関連試料の所在が伴っていることが必要である。近年、地球惑星物質の分析データのアーカイブが進められている。例えば GEOROC(5)、PetDB(6)、GeoReM(7)、NAVDAT(8) といったオンラインシステムでは、出版された岩石の化学・同位体組成に参照できる。これらは、多種多様な分析データに系統的かつ迅速にアクセスする機会を与え大変有用であるが、試料の再分析にはさほど役立たない。我々が構築を目指すのは、出版されたデータを格納するデジタルアーカイブではない。実験室で継続して試料を管理(収集、記載、管理、配付、公開、すなわちキュレーション)し、試料の再分析そして科学の継続発展を支援するデポジトリである。このデポジトリは物質試料そのもの、それを格納するハードウェア、そして情報を管理するデータベースから構成されることとなる。データベースは組成や物性情報のみならず、物質の処理法や機器分析の条件、分析箇所を記録する画像といった公開を前提としない情報をアーカイブする。このようなデポジトリは現存せず、研究者の退官と同時に、試料整理と称し大半の試料が破棄されている。

## 2. メデューサ

我々がこのようなデポジトリを構想している中、ハヤブサミッションにおける初期分析を担当した(9)、試料は分析に応じさまざまに加工され、短期間に多くの実験室を回遊した。このような動的状況を記録し、試料状態を共有し、試料を継承するには、試料管理と化学分析データのカタログ化を統合的に行う専用データベースシステムの開発が必須であるとの認識に至った。

DREAM(<http://dream.misasa.okayama-u.ac.jp/>) は専用データベースシステム・メデューサ(10)を中核に据えた、物質と分析データを継承するためデポジトリである。本章ではデータベースシステム・メデューサを簡単に紹介する。

メデューサはウェブアプリケーションフレームワークである Ruby on Rails を用いて開発された。ユーザーはウェブブラウザもしくはウェブ API を用いたクライアントプログラムによってアクセスする。

メデューサは、出版されたデータを扱うのみならず、物質が変化し移動する様を追跡する。これは試料加工に伴い発生する試料-子試料-孫試料という親子関係と、建物-部屋-棚-容器などの格納状況を表現すると換言できる。試料の親子関係は stone クラスの内部リンク、格納状況は box クラスの内部リンクによって記述する。この二つを含む代表的なクラスを表に、それらの相互関係を図 1 に示す。以下に採取・加工・格納・分析において発生するレコード関係を記す。

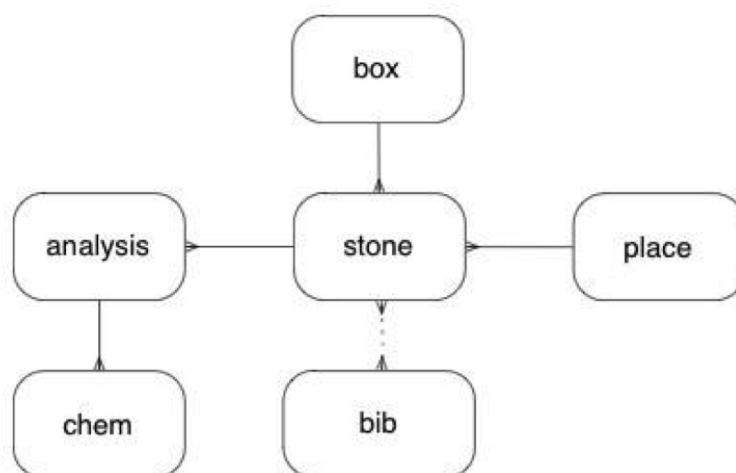


図 1 試料を記述するクラスの関係。線端の三本足は複数のレコードとリンクされる関係性を示す。例えば analysis は複数の chem とリンクすることが多い。破線は研究成果が公表された時に発生する文献へのリンクである。

表 1 メデューサの扱うレコードの種類

| クラス      | 説明                           |
|----------|------------------------------|
| stone    | 試料そのもの                       |
| box      | 試料を保管する箱, 棚, 部屋, 建物, またはマウント |
| place    | 試料の採取地点                      |
| analysis | 試料を分析した手法                    |
| chem     | 分析によって得られた化学特性 ( 元素・同位体存在度 ) |
| bib      | 分析結果を公表した論文                  |

採取時に試料 (stone) と場所 (place) の関係が発生する ( 図 2 ). 実験室に運ばれた試料は薄片・粉末・溶液へと加工される. これら子試料に対応する stone レコードが作成され, リンクにより親子関係が表現される ( 図 2 ). 同様の試料の所在は box レコードのリンクにより表現される. 粉末試料は密閉式ボトルに封入され, 他試料と共にクリーンルームの棚に納められる ( 図 3 ). 続いて分析が行われる. 図 4a は全岩分析 (analysis) によって決定した複元素濃度 (chem) が試料 (stone) に関連付けられている様子である. スポット分析では試料表面の多点から複数の元素濃度を得て, 図 4b に示す分析点への多重リンクを加えて表現される.

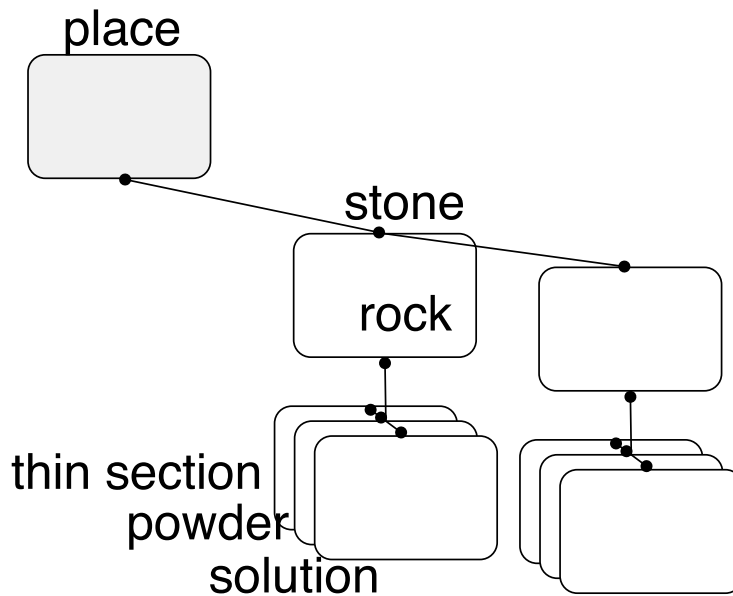


図 2 試料の親子関係の表現するレコード: 採取点から 2 つの岩石が採取され, それぞれから薄片, 粉末, 溶液が作成された状況を表現している.

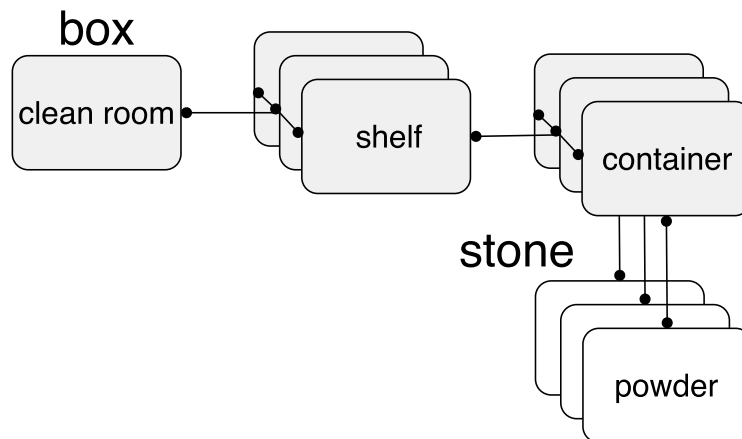


図 3 試料の格納状況の表現するレコード: 複数の粉末試料が個別に容器に保存され, それらがクリーンルーム内の棚に格納されている状況を表現している.

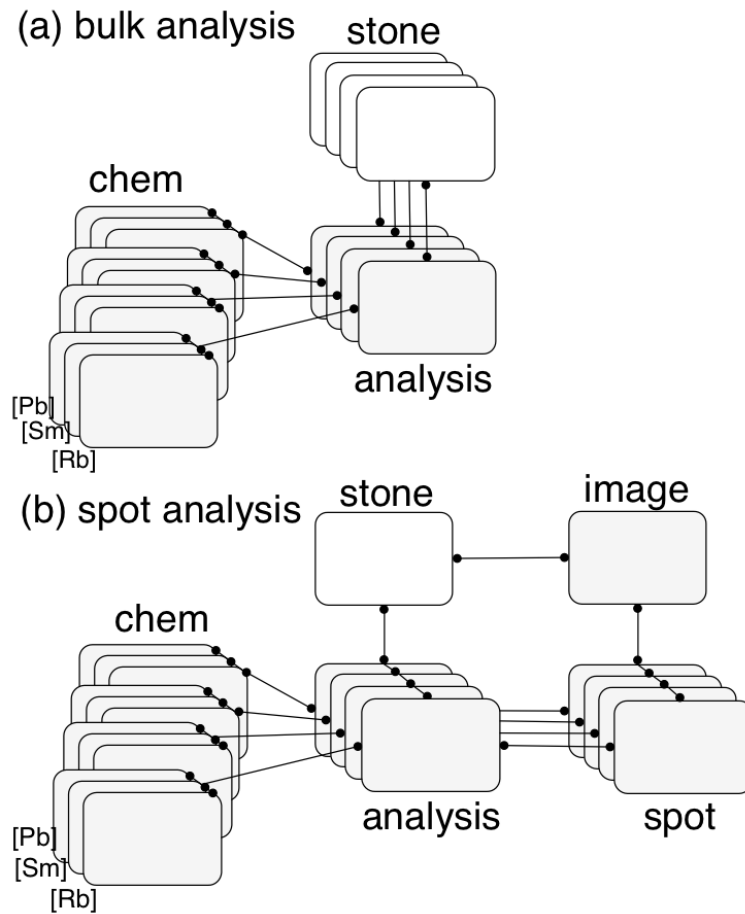


図4 試料の分析状況の表現：(a) 全岩試料の分析によって Pb,Sm,Rb 濃度を得た状況を表示する；(b) スポット分析によって試料表面の多点から Pb,Sm,Rb 濃度を得た状況を表示する。

上記の入りくんだレコード関係はメデューサによってダイナミックに辿られ、親子関係、位置関係、分析結果がウェブブラウザにて表示される。イトカワ回収試料を閲覧したものを図5に示す。イトカワ試料は8つの標準試料と共にマウント“mount-K002-b”に搭載され、棚“Hayabusa1”に保管される。イトカワ試料の家系と、8つの標準試料が一つのマウントに格納される状況が画面左手上下の樹形図にて表現される。鉱物片に対して行われた分析の結果は、右手にテーブルとして示される。

### 3. 現状

DREAMには年3,000の試料が追加され現在12,000点が登録されている。試料のみならず、備品、消耗品、そしてソフトウェアのライセンスも管理され、DREAMは既に実用段階にあるといえる。しかしいくつかのパイロットデータを除き公開に至っていない。DREAMの現在の課題を以下に述べる。

#### 3.1 作業インフラの充実

試料はIDにより識別される。実空間の物質試料とデータベース空間のレコードはこのIDで連結するため、試料はIDを記したメディア(ラベルと呼ぶ)と共に行動する必要がある。子試料が発生する度にレコードのとラベルを作成する必要があり、試料を移動する度にデータベースを更新する必要がある。

従ってレコードとラベルの作成と、現在位置の更新を迅速に行う環境の整備はDREAM運用の必要条件のひとつである。環境不備は、本来の作業に影響を与え、即試料の管理放棄につながる。ウェブブラウザのみで試料管理を行うことは事実上難しい。

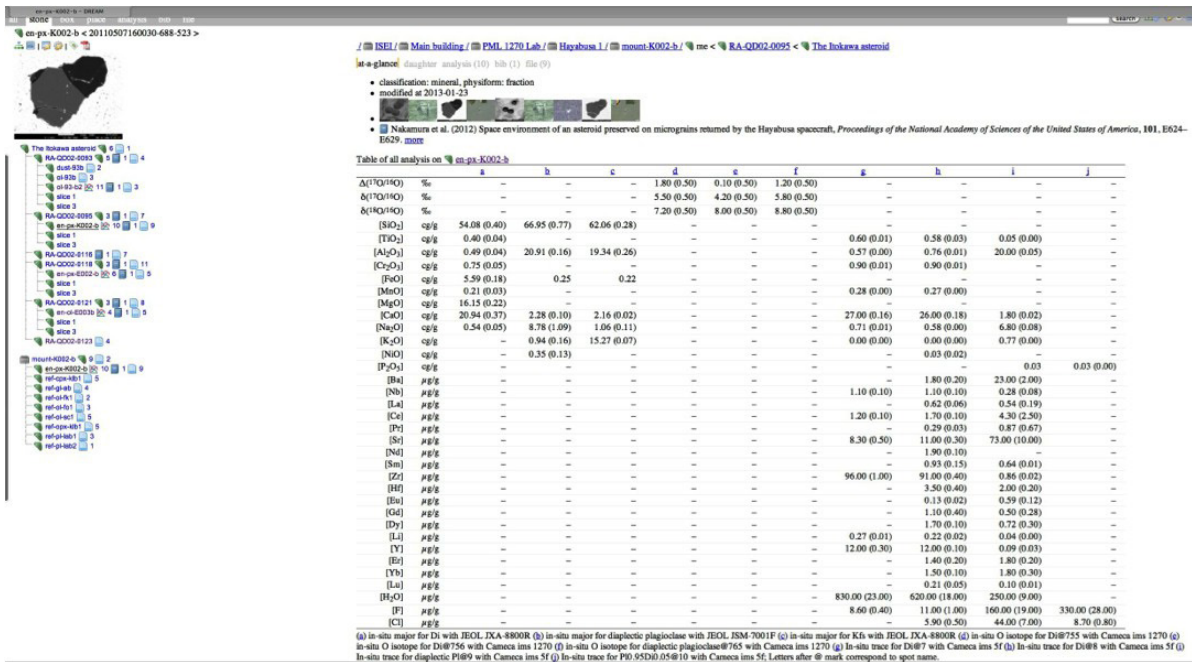


図 5 ウェブブラウザを用いて小惑星イトカワから回収された鉱物片 (low-Copyroxene) を観閲している様子：イトカワ試料は 8 つの標準試料と共にマウント “mount-K002-b” に搭載され、棚 “Hayabusa1” に保管される。イトカワ試料の家系と、8 つの標準試料が一つのマウントに格納される状況が画面左手上下の樹形図にて表現される。鉱物片に対して行われた分析の結果は、右手にテーブルとして示される。

現在は 10 セットのラップトップコンピュータ、テーププリンタ、バーコードリーダー、カメラ、ハンドヘルドコンピュータを各現場に配備している (図 6)。これらの作業インフラを拡大し、保守性、機能性、使い勝手と安定性を高めることは緊急の課題である。



図 6 作業現場に配置される “DREAM 屋台” と呼ばれるポータブル作業環境：ラップトップコンピュータ、テーププリンタ、バーコードリーダー、カメラ、ハンドヘルドコンピュータから構成される。移動させて利用することが前提となるため、UPS で駆動する。

### 3.2 メデューサの最適化

現在のメデューサはパフォーマンス、ユーザーインターフェース、そしてセキュリティに不安を持つ。

メデューサはリンクをダイナミックに辿る。重要な試料や標準試料などリンクを多く持つ試料を閲覧する際にはレスポンスが問題となる。また、ルーチンをスピードを持ってこなす機能に足りない。例えば試料を6つ載せたマウントを登録するにはよくある作業なのだが表2に示すよう48行程が必要である。他にも例えば現場での操作ミスをリカバーする方法に足りない。誤って消去したレコードを復旧することは可能であるが、あらゆるデータを同時に一日前に戻すことになる。

これらの問題を解消するため、クライアントの開発を含め、ソフトウェアとしてのメデューサの最適化をはかる必要がある。

### 3.3 アロケーション体制/データ登録ガイドラインの整備

現在出版されたものについて“試料の存在と分析データ”の公開を目指している。特定試料を公開することに技術的困難はない。しかし公開後は、サンプルリクエストに対応する必要が生じる。アロケーション委員会の整備が公開の必要条件だが、現在はメデューサの開発に注力する段階にあり、組織整備に至っていない。メデューサは、出版以前の分析データの共有を可能とする。研究の渦中にある関連試料の存在やその格納場所、また分析データを系統的に示す機能は非常に有用である。ただし(出版されたデータと異なり)出版前のデータは処理の再検討等による変更がありえるため、取り扱いに注意が必要である。まず、出版前のデータ登録について、ガイドラインを整備する予定である。その後、生データから動的にデータ処理を行う機能の実装を計画している。

表2 試料を6つ載せたマウントをメデューサに登録に必要な作業

| 作業                         | 手数 |
|----------------------------|----|
| 新規マウントを登録                  | 1  |
| マウントのグループとパーミッションの設定       | 1  |
| マウントの格納場所(例:クリーンベンチ)を入力    | 1  |
| マウントのラベルを印刷                | 1  |
| マウントの写真撮影・アップロード           | 1  |
| マウント写真のグループとパーミッションの設定     | 1  |
| それぞれの試料を新規登録               | 6  |
| それぞれの試料のグループとパーミッションの設定    | 6  |
| それぞれの試料の格納場所(マウント)を入力      | 6  |
| それぞれの試料の親を入力               | 6  |
| それぞれの試料の写真をアップロード          | 6  |
| それぞれの試料のマウント内位置を入力         | 6  |
| それぞれの試料の写真のグループとパーミッションの設定 | 6  |
| 計                          | 48 |

## 4. まとめ

岡山大学地球物質科学研究センターでは、岩石試料を分析データとともに将来引き継ぐべく、地球惑星試料デポジトリ DREAM を構築中である。本稿ではその構想、現状について述べた。DREAM は試料管理のための開発されたデータベースシステム・メデューサを核とする。メデューサは分析データのみならず加工履歴、保管場所、分析条件など情報を統合し、試料を追跡する。

現在メデューサのドキュメント整備を終え、安定版の開発に着手したところである。安定版では、パフォーマンスが向上すると同時にセキュリティの強化がなされ、また簡便な導入と運用が可能となる。

## 参考文献

- [1] Burnett D.S., Barraclough B.L., Bennett R., Neugebauer M., Oldham L.P., Sasaki C.N., Sevilla D., Smith N., Stansbery E., Sweetnam D. and Wiens R.C. (2003) The Genesis Discovery Mission: Return of solar matter to Earth. *Space Science Reviews*, 105, 509-534.
- [2] Brownlee D.E., Burnett D., Clark B., Hanner M.S., Horz F., Kissel J., Newburn R., Sandford S., Sekanina Z., Tsou P. and Zolensky M. (1996) STARDUST: Comet and interstellar dust sample return mission. In: Gustafson B.A.S. and Hanner M.S. (eds), *Physics, Chemistry, and Dynamics of Interplanetary*, IAU Colloquium 150, Astronomical Society of the Pacific Conference Series, 104, 223-226.
- [3] Fujiwara A., Kawaguchi J., Yeomans D.K., Abe M., Mukai T., Okada T., Saito J., Yano H., Yoshikawa M., Scheeres D.J., Barnouin-Jha O., Cheng A.F., Demura H., Gaskell R.W., Hirata N., Ikeda H., Kominato T., Miyamoto H., Nakamura A.M., Nakamura R., Sasaki S. and Uesugi K. (2006) The rubble-pile asteroid Itokawa as observed by Hayabusa. *Science*, 312, 1330-1334.
- [4] McKeegan K.D., Kallio A.P.A., Heber V.S., Jarzembinski G., Mao P.H., Coath C.D., Kunihiro T., Wiens R.C., Nordholt J.E., Moses Jr. R.W., Reisenfeld D.B., Jurewicz A.J.G. and Burnett D.S. (2011) The oxygen isotopic composition of the Sun inferred from captured solar wind. *Science*, 332, 1528-1532.
- [5] Sarbas B. (2002) Geochemistry of oceanic island-arc and active continental margin volcanic suites: Some statistical evaluations and implications using the database GEOROC. *Eos Transactions AGU*, 83, Fall Meeting Supplement, Abstract V62B-1401.
- [6] Lehnert K., Su Y., Langmuir C.H., Sarbas B. and Nohl U. (2000) A global geochemical database structure for rocks. *Geochemistry Geophysics Geosystems*, 1, 1012, doi:10.1029/1999GC000026.
- [7] Jochum K.P., Nohl U., Herwig K., Lammel E., Stoll B. and Hofmann A.W. (2005) GeoReM: A new geochemical database for reference materials and isotopic standards. *Geostandards and Geoanalytical Research*, 29, 333-338.
- [8] Carlson R.W., Walker J.D., Black R.A., Glazner A.F., Farmer L. and Grossman J. (2001) NAVDAT: a western North American volcanic and intrusive rock geochemical database. *Geological Society of America, Abstracts with Programs*, 33, 175.
- [9] Nakamura, E., Makishima, A., Moriguti, T., Kobayashi, K., Tanaka, R., Kunihiro, T., Tsujimori, T., Sakaguchi, C., Kitagawa, H., Ota, T., Yachi, Y., Yada, T., Abe, M., Fujimura, A., Ueno, M., Mukai, T., Yoshikawa, M. and Kawaguchi, J. (2012). Space environment of an asteroid preserved on micrograins returned by the Hayabusa spacecraft. *PNAS Plus*, 109 (11), 4031-4032.
- [10] Yachi Y., Kitagawa H., Kunihiro T. and Nakamura E. (2013) Software dedicated for curation with geochemical datasets in an analytical laboratory. *Geostandards and Geoanalytical Research*, in-press, DOI: 10.1111/j.1751-908X.2013.00205.x