

材料科学数据共享工程技术标准

材料科学数据框架规范

Standards Framework for Materials Science Data Sharing

(讨论稿)

(本稿完成日期：2010年07月)

2010-07 发布

材料科学数据共享标准规范课题组

材料科学数据框架规范

1. 目的和意义

材料科学数据框架规范描述材料科学数据共享标准体系的组成，它确定材料科学数据共享标准化工作的方向，明确材料科学数据共享标准化工作的任务和内
容，用于指导材料科学数据共享标准化工作。

2. 范围

描述材料科学数据共享工程的标准体系的组成，给出各个材料科学数据共享标准与规范的名称，并阐述每个标准的内容和用途。

3. 与《科学数据共享工程标准体系及参考模型》的关系

材料科学数据共享工程标准框架体系中所规定的标准与规范属于《科学数据共享工程标准体系及参考模型》中的专用标准，依据《科学数据共享工程标准体系及参考模型》中的指导标准以及通用标准中的相关基本原则和方法，并结合材料科学数据的领域特点进行编制的。该框架体系中的专用标准用于满足材料领域数据共享的需求，重点反映材料领域数据的特点。

4. 材料科学数据共享标准框架体系内容

依据科学数据共享标准体系框架参考模型，结合材料科学领域的具体特点，将材料科学数据共享工程标准框架的内容总结如下表所示：

类别	标准名称	参考标准
数据	材料科学数据元数据内容	SDS/T 2111 -2004 SDS/T 2112 -2004
	材料科学数据分类与编码	SDS/T 2121 -2004 材料科学相关标准
	材料科学数据模式描述标准	SDS/T 2133 -2004
	材料科学数据交换格式	SDS/T XXX -2004 MatML Schema
	材料数据库设计规范	
	材料科学数据元目录	SDS/T 2132—2004 SDS/T 2131—2004

服务	材料科学数据共享工程数据与服务注册规范	SDS/T 2213—2004
	材料科学数据共享工程数据访问服务接口规范	SDS/T 2221.2—2004
管理与建设	材料科学数据共享工程数据质量管理规范	
	材料科学数据中心及资源共享节点运行管理规定	SDS/T 2313—2004

以上标准在《科学数据共享工程标准体系及参考模型》中的各个标准和规范的基础之上进行裁剪和扩充。除此之外，在材料科学数据共享工程建设中还有一些规范可以直接参照《科学数据共享工程标准体系及参考模型》中的通用标准进行执行，例如《科学数据中心建设规范》、《科学数据网建设规范》等。

(1) 数据类

● 材料科学数据元数据内容

本标准规定了材料科学数据的元数据内容和编写元数据的方法，适用于对材料科学数据集的描述、材料科学数据集的编目和材料科学数据共享服务。材料科学数据的元数据可以用于描述材料数据的来源信息，辅助材料数据的查找、定位和检索，是实现材料科学数据共享的基础。

本标准依据科学数据共享工程技术标准《科学数据共享工程技术标准-元数据标准化基本原则和方法》(SDS/T 2111 -2004)，主要参考科学数据共享工程技术标准《科学数据共享工程技术标准-科学数据共享元数据内容》(SDS/T 2112 -2004)，结合材料科学数据的特征增加材料科学数据元数据实体和元素。选用《科学数据共享工程技术标准-科学数据共享元数据内容》(SDS/T2112 -2004)中全部核心元数据、公共元数据的子集、实体和元素，以及参考元数据中的参照系子集的部分实体和元素，并增加材料领域的相关实体。本标准在扩展过程中遵循《元数据标准化基本原则和方法》标准对元数据裁减、扩展所做的规定，符合该标准中的规定的科学数据共享元数据标准框架。

● 材料科学数据分类与编码

本标准规定材料科学数据的分类与编码方法，确定材料科学数据的具体分类

与代码。适用于材料科学数据共享项目中的材料科学数据共享中心、共享资源节点的数据管理和交换。

材料科学数据分类与编码标准是遵循《科学数据共享工程技术标准-分类与编码基本原则与方法》（SDS/T 2121 -2004），面向材料科学领域科学数据共享中心和共享资源节点的资源采集、加工、汇集、交换等需求，提供标准的分类与编码标准文档。本标准规定了材料学数据分类和编码的规则，用以实现材料科学数据数据组织、存储及交换的一致性。

● 材料科学数据模式

本标准规定科学数据共享工程材料科学数据模式的描述方式以及其基本内容。本标准适用于指导共享材料科学数据集数据模式的编写。

本规范的目的在于结合材料科学领域数据资源的特点，在遵循《科学数据共享工程技术标准-数据模式描述规则与方法》（SDS/T 2133 -2004）以及国家科学数据共享工程相关标准规范的基础上，提出材料科学领域数据模式标准。

● 材料科学数据交换格式

本标准规定了在材料科学数据共享项目中的数据交换格式。本标准适用于材料科学数据共享中心与各个资源共享节点之间进行数据交换的语法格式。本标准遵循《科学数据共享工程技术标准-数据交换格式设计规则》（SDS/T XXX -2004），结合材料科学领域的相关数据交换规范（如性能数据参考MatML），提出材料科学领域的的数据交换格式标准。

● 材料数据库设计规范

本标准规定了材料科学数据共享中心和各资源节点建立材料科学数据库时应遵循的基本原则和方法，适用于材料科学领域各类数据库的设计、构建和运营维护的全过程。

主要内容包括材料科学数据库的体系结构、数据库设计流程、数据库建设原则与规范化、数据库的物理实施、数据库建立所需文档定义和模板、数据库建立的具体实例等信息。

● 材料科学数据元目录

本标准规定了材料科学数据共享工程中涉及到的数据元的内容及其表达,适用于材料科学数据共享工程中的数据采集、加工、处理、交换和共享过程,用于指导材料领域科学数据共享工程各建设单位研究和制定数据元目录使用。

本标准遵循《科学数据共享工程技术标准-数据元标准化的基本原则与方法》(SDS/T 2132—2004),在《科学数据共享工程技术标准-公共数据元目录》(SDS/T 2131—2004)的基础上,围绕材料领域各种类型科学数据库以及数据交换对数据元标准化的需要,规定数据元的提取、命名、标识、描述、分类、值域范围确立的基本原则与方法,数据元目录的格式规范。

(2) 服务类

● 材料科学数据共享工程数据与服务注册规范

材料科学数据共享工程的注册服务用于材料科学数据共享资源的注册,通过服务资源的发布、发现、访问机制,实现服务资源共享。本标准参照《科学数据共享工程技术标准-数据与服务注册规范》(SDS/T 2213—2004),并根据材料领域的特点进行适当扩充,使其符合材料科学数据共享工程的需求。

● 材料科学数据共享工程数据访问服务接口规范

材料科学数据共享工程的数据访问服务接口规范描述了数据服务的接口定义和访问协议。本标准参考《科学数据共享工程技术标准-数据访问接口规范》(SDS/T 2221.2—2004)的方式,定义出适合材料科学领域的数据访问接口规范,包括数据访问所使用的语言、参数、服务响应、数据返回格式等多方面的内容,指导材料科学数据共享工程数据访问系统的开发与实现。

(3) 管理类

● 材料科学数据质量管理规范

本规范阐述材料科学数据共享工程中识别和报告质量信息的基本方法,规范质量控制的基本原则。本规范适用于材料科学数据共享工程中数据、服务、运行管理及建设的质量管理。规范的制定参照《科学数据共享工程技术标准-质量管理规范》,并结合材料科学数据共享工程的特点进行编写。

- **材料科学数据中心及资源共享节点运行管理规定**

本规范描述材料科学数据共享系统运行时所应遵循的相关规定，包括材料科学数据中心以及各个资源共享节点中的人员管理、系统管理、操作管理、数据资源管理和安全管理等。该规范参照规范的制定参照《科学数据共享工程技术标准-科学数据中心（网）运行管理》，并结合材料科学数据共享工程的特点进行编写。