

# 卒業論文

## 第一原理計算による体積-エネルギー曲線 データベースの構築

関西学院大学 理工学部 情報科学科  
2670 梶本 秀則

2006年 3月

指導教員 西谷 滋人 教授

## 概 要

NIMS(物質材料研究機構) が提供する材料開発支援データベースの一つにエネルギーの体積依存性を第一原理計算によって求めたグラフがある。このデータベースは理論予測において非常に重要な基礎データである。しかし、このデータベースには2つの問題点、『データ収集の困難さ』と『データ利用の不便さ』とがある。

これらの問題点をCMS（コンテンツマネジメントシステム）を参考にして解決策を考えた。CMS とは、Wiki や Blog などのインターネットを利用した、近年急速に発達している情報構築の新しいシステム群を指す。そこでは、インターネットを利用せずにデータを蓄積する従来の形態から、インターネットを利用して多くのユーザによって更新する形へ変化している。

具体的には、NIMS の提供する数値データから体積-エネルギー曲線を描画する Maple スクリプトを作成した。これによってユーザが求めたデータとデータベース中のデータとの比較を自動化することが可能となる。このシステムをサーバー側で提供することによって、ユーザからの入力データをデータベースへ容易に登録することが可能となる。

データの比較が自動化されることで、データ利用の増加が期待できる。またこの自動化によってデータ数の増加が期待できる。これらの改善によってデータベースの価値が上がり、ユーザの増加、データベースの活性化につながるという好循環が期待できる。

# 目 次

第 1 章	目的	3
第 2 章	NIMS のデータベースの分析	5
2.1	NIMS のデータベースについて . . . . .	5
2.1.1	NIMS のデータベースの概要 . . . . .	5
2.1.2	NIMS の材料データベースのデータ収集方法 . . . . .	5
2.1.3	材料データベースのあり方 . . . . .	10
2.2	NIMS における計算物性データベースの問題点 . . . . .	11
2.2.1	データの収集 . . . . .	11
2.2.2	データの利用 . . . . .	12
第 3 章	データ利用プログラム	14
3.1	Murnaghan の状態方程式 [3] . . . . .	14
3.2	データプログラム . . . . .	17
3.3	プログラムの流れ . . . . .	20
3.4	データプログラムの失敗例 . . . . .	21
3.4.1	失敗例その 1 . . . . .	21
3.4.2	失敗例その 2 . . . . .	22
3.5	提案システムのメリット . . . . .	22
第 4 章	CMS との対比	24
4.1	Wiki,Blog の分析 . . . . .	24
4.1.1	blog . . . . .	24
4.1.2	Wiki . . . . .	25
4.2	CMS に残された課題 . . . . .	25
4.2.1	情報の信頼性 . . . . .	26
4.2.2	動機 (インセンティブ) . . . . .	27
4.2.3	データベース構築システムでの問題点 . . . . .	27
第 5 章	まとめ	28

付 録 A	29
A.1 「知」の創造にシステム革命, 坂村健 (日本経済新聞 2005 年 (平成 17 年)8 月 26 日, 朝刊) . . . . .	29
A.2 材料情報データ, 情報の取得と発信, 山崎政義, 材料基盤情報ステーションデータベース研究グループ . . . . .	32

# 第1章 目的

NIMS(物質材料研究機構)(National Institute for Materials Science) が提供する物質・材料データベースの一つに計算物性データベースがある (図 1.1). その中で, エネルギーの体積依存性を第一原理計算によって求めたグラフが提供されている. これは, 材料の生成熱, 熱膨張などの物性の理論予測に必要となる基礎データとして提供されている. それだけでなく, 計算の精度や信頼性を測る指標としても重要である. このように, 第一原理計算をする上でこのデータベースは最も基本となるデータであり, 材料開発への応用という観点からこのデータベースの活性化が期待されている. しかし, このデータベースは利用者が必ずしも多いとは言えず, データ量が充実しているとは言えない. また, データの更新が凍結しているために, データが古く精度が悪いまま放置されたデータも散見される.

従来のデータベースはデータ, ユーザインタフェース, 利用者の3つで成立している. 通常のデータベースあるいはそのシステムを考える際は, 利用者の利便性から, データハンドリングあるいはユーザインタフェースの設計を考えることが多い. 対象のデータベースではデータの収集, 構築にも問題があると考えられる. 従って, 従来型のデータベースの設計ではなくデータベースの構築まで含めたシステム開発が要求されてくる.

そこでインターネットで急速に発達している Wiki, あるいは Blog などのコンテンツマネジメントシステム (CMS) に注目した. これらの新しく利用が活性化しているシステムでは, 情報の交換を行う場として, いつでもどこでも誰もが編集閲覧可能で, 共同作業の場を提供してくれる. これらのシステムの特徴を参考にし, それらの利点をデータベースに適用する事を試みる.

本研究では, NIMS のデータベースをより活性化するサーバー側の仕組み, つまり, データ加工をサーバで, データの収集をユーザから行えるようにする仕組みを提案する.

NIMS 独立行政法人 物質・材料研究機構 **MITS** 材料基盤情報ステーション [必須システム環境\(プラグイン\)](#)

**NIMS物質・材料データベース** [アクセス\(PDF\)](#) [English](#) 登録ユーザー数: 74カ国、6800機関18000人 (2005/7/31 現在) [ご意見/ご感想 等](#) [DB活用事例 募集](#) [参考文献](#)

▶ NIMS MITS MDG NIMS Materials Database News Link ◀

**Mat Navi** NIMS物質・材料データベース内を統合検索するシステムです。 **MATDATA.net** Material Data Network参加のデータベースを統合検索するシステムです。 **NIMS研究成果データベース**

**高分子**  
● [高分子データベース](#)

**基礎物性**  
● [結晶基礎データベース](#)  
● [計算物性データベース](#)  
● [拡散データベース](#)  
● [三次元状態図データベース](#)

**材料設計支援ツール**  
● [高分子物性推算システム](#)  
● [複合材料熱物性予測システム](#)

**新着情報**  
■ 2005/09/07  
[複合材料熱物性予測システム](#)にポリマーデータを追加しました。  
■ 2005/07/13  
[ご意見/ご感想 等](#)を作成しました。データベースに関するご意見・ご感想をご自由にご記入ください。  
■ 2005/06/27  
[構造材料データベース](#)、疲労データシートNo.97、98を追加しました。

**金属材料**  
● [構造材料データベース](#)  
● [基盤原子力用材料データベース](#)  
● [圧力容器材料データベース](#)  
● [鉄鋼材料熱履歴データベース](#)

**超伝導**  
● [超伝導材料データベース](#)  
● [強磁場工学データベース](#)  
[\\*個人情報取り扱いについて](#)  
[\\*著作権・免責事項など](#)

**ユーザー登録** [ユーザー情報変更](#) [退会](#) [<詳細>](#)  
● 印のデータベースを一度に登録することができます。  
登録・検索・閲覧は無料です。

**お問い合わせ**

since April 1, 2003 **127675**

本システムはSSL暗号通信を採用していますので情報のやりとりは安全に行われます。  
**Materials Information Technology Station**

このページを気に入った方はリンクを張って他の人に紹介してください。

更新日: 2005/09/07

図 1.1: NIMS の物質・材料データベースのホームページ。

## 第2章 NIMS のデータベースの分析

NIMS のホームページに掲載されているデータベースの説明をしていく。まずは、掲載されている NIMS のデータベースの概要について述べていく。そしてその NIMS のデータベースの構築にあたってのデータの収集方法が具体的に4つ挙げられる。どのようにデータベースがそれぞれ構築されたのか、その方法について説明していく。それらのデータベースの構築にあたっての長所、短所について分析する。また、この NIMS における材料データベースのあり方について述べていく。

### 2.1 NIMS のデータベースについて

#### 2.1.1 NIMS のデータベースの概要

NIMS のホームページに掲載されているデータベースの概要を説明する、これは1996年度～2002年度の間で科学技術振興事業団 (JST) によって開発され、(NIMS) によって提供されているデータベース・システムである。

#### 2.1.2 NIMS の材料データベースのデータ収集方法

NIMS の中に存在する材料データベースを開発する際には様々な方法がとられてきた。構築方法には代表的なものが4つある。これら4つの代表的な構築方法を挙げていく。そして、それらのデータベース構築にあたっての利点、欠点を挙げていく。

##### 開発方法 (1)

材料特性取得グループ (研究者あるいは研究グループ) が確立された手法による計算値の実験データを材料データベースシステム開発者に依頼しデータベースを構築する方法である。この実験データはすでに確立された手法によって計算データが得られているためにデータの選択、評価を必要としない。構造材料データベース、鉄鋼熱履歴データベース、計算物性データベース、三次元状態図がこのように構築された。

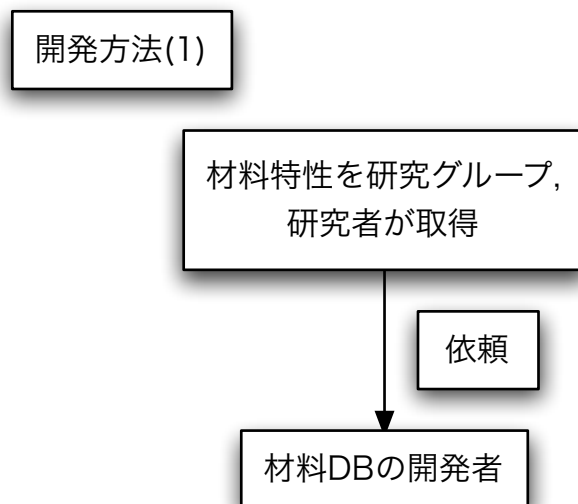


図 2.1: 材料データベースの開発方法 (1)

## 開発方法 (2)

材料データベースの開発機関が材料データ編集者と契約する。その材料編集者が多くの研究者と契約して、データのデジタル化作業をそれぞれの研究者に依頼する。編集者が文献の収集、選択、評価を行う。著作権は開発機関にある。結晶基礎データベース、高分子データベースがこのように構築された。



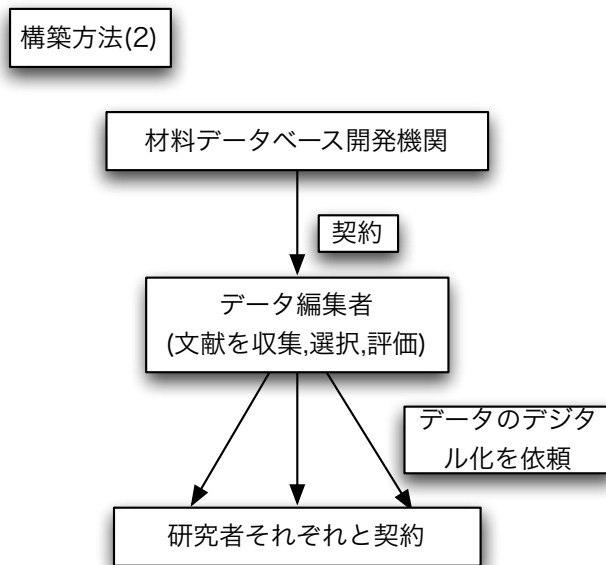


図 2.2: 材料データベースの開発方法 (2)

### 開発方法 (3)

学協会 (物理学協会など) が材料データベース開発委員会を設立する。その開発委員会がそれぞれの機関にボランティアでデータのデジタル化作業を依頼する。委員会がデータ及び、文献収集、選択、評価を行う。データの著作権はそれぞれの機関にある。圧力容器材料データベース、基盤原子力材料データベースがこのようにデータが収集、選択、評価されデータベースが構築された。

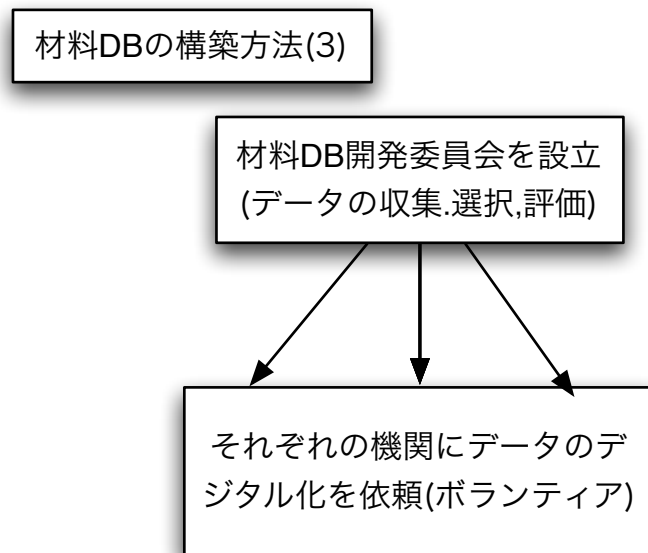


図 2.3: 材料データベースの開発方法 (3)

#### 開発方法 (4)

材料データベース開発機関が材料データ採取, 編集者と契約する. その編集者が文献収集, 選択, 評価を行い, データのデジタル化作業を行う. この方法で拡散データベース, 超伝導材料データベースを構築した.

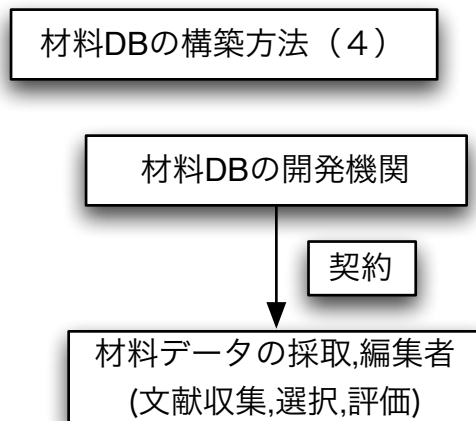


図 2.4: 材料データベースの開発方法 (4)

4つの代表的なデータベースの構築方法について述べてきた。これらのデータベースの構築方法における利点、欠点を整理して表にまとめたものが、以下の表である。

表 2.1: NIMS のデータベースの構築方法のまとめ.

開発方法	利点	欠点
1	確立された方法によって値が求められている.(データの信頼性が高い)	ユーザによってデータベースが構築されない. ユーザとデータベースの構築とのギャップが生じる可能性がある.
2	それぞれの研究者によってデータのデジタル化作業が行われているためにさまざまな計算方法でのデータが得られる. 著作権が明確である.	データの編集, 評価が多く研究者からデータを取得するため大変である.
3	データのデジタル化をそれぞれの機関に依頼しているためデータの網羅性がある.	それぞれの機関にボランティアで依頼しているため意欲が不透明で可能性があるの信頼性にかける.
4	1つのグループでデータベースが作成されるので統一性がとれる.	データ採取, 編集を1つのグループで行うため, そのグループの意向がそのまま反映される可能性がある.(データの偏重)

### 2.1.3 材料データベースのあり方

NIMS のデータベースの中にある材料データベースについて述べていく. 材料基盤情報ステーション材料データベース研究グループの山崎氏は以下のように材料データベースを分析している. [1]

科学技術の基本的なデータや情報は長い間事典, 辞典, 便覧, ハンドブック, データブックの印刷物として利用されてきた. 1960年にコンピュータが普及し始め, そのデータをデジタル化する可能性が検討され, その情報処理機器の目覚ましい進歩とともに, 多くのデータベースが構築されてきた. その後急速なインターネットの普及により, 世界中の人々がデータや情報を迅速に共有できるようになった.

物質、材料のデータは2つのカテゴリーに分けられ

1. 普遍性が高く高品質な基礎データ (物理係数, スペクトル情報, 核データ, 構造鈍感な特性, 結晶構造および状態図など)
2. 基盤工学データ (設計や安全評価の基盤となる実用材料の諸特性). インターネットで公開されている物質, 材料データベースの現状と問題点について述べていく.

NIMS のデータベースには基盤原子力材料データベースに核データが, また結晶基礎データベース, 計算物性データベースには結晶構造および状態図が含まれている. このようなデータ活動については同様の作業の重複を避けて, 国際連携による効率的なデータベース構築を行い, 世界中で使われる公共財として整備される事が望まれる.

基礎的工学データおよび情報は材料開発に携わる研究者, 技術者ばかりではなく機器の設計者にとっても必要不可欠である. 基礎的工学データは材料設計および各種シミュレーションを行う際のデータとして用いられる. また, 機器設計のための材料選択および材料の最適利用のためにも利用される. 基盤的工学データは物質, 材料データベースはデータの信頼性 (質) が最も大事と考えられがちであるが, データの網羅性 (量) も非常に重要である. さらにデータベースはデータの蓄積ばかりではなく, 利用者が必要とするデータや情報をできるだけ速やかに表示する検索機能がかねそなえていなければならない. しかし, 1つの機関で発信できるデータの量や情報には限度がある. そこでインターネットで公開されている物質材料データベースをつなぎ各データベース別に検索可能なシステムもイギリスで公開されてきている.

従来のデータベースは開発者のグループのみが利用し, 研究開発期間が終了するとデータの追加もなく消滅してしまう事が多かった. データベースは利用者のニーズを把握し, 継続的にデータを蓄積して, 利用されるデータベースを構築しなければならない.

## 2.2 NIMS における計算物性データベースの問題点

NIMS の計算物性データベースには, 2つの大きな問題点があり, それらをそれぞれ分析していく.

### 2.2.1 データの収集

1つ目にデータ収集の困難さである. この計算データの自製には計算資源, 労力, 専門性などが要求される. 一方, 論文データとしてはあまりに基礎的であるため, 数値データとして掲載される事がほとんどない. 物質, 材料データベース

はデータの信頼性 (質) が最も大事と考えられがちであるが、データの網羅性 (量) も非常に重要である。従来のデータベースは開発者のグループのみが利用し、研究開発期間が終了するとデータの追加もなく消滅してしまう事が多かった。利用者のニーズを把握し、継続的にデータを蓄積して、それを更新していき、利用されるデータベースを構築しなければならない。

### 2.2.2 データの利用

2つ目にデータの利用である。与えられているデータが図形であるために、ユーザまたは、計算方法によって図形を代表するパラメータ、単位などが異なり、直接的な比較や数値データとしての利用を困難にしている。具体例として bcc-Ti 構造におけるエネルギーと体積依存性を考える。求められた値は NIMS によって与えられているデータとの単位が異なり、データを比較する事が一度ではできない。第一原理計算によって我々が求めたエネルギーと体積依存性の値はエネルギーは eV (エレクトロンボルト)、体積は Å (オングストローム) という単位となる。一方で NIMS のデータベースで求められた値はエネルギーは Ry (リュドベリ)、体積は a.u. (原子単位) で値が求められているため、単位を調整する必要がある。

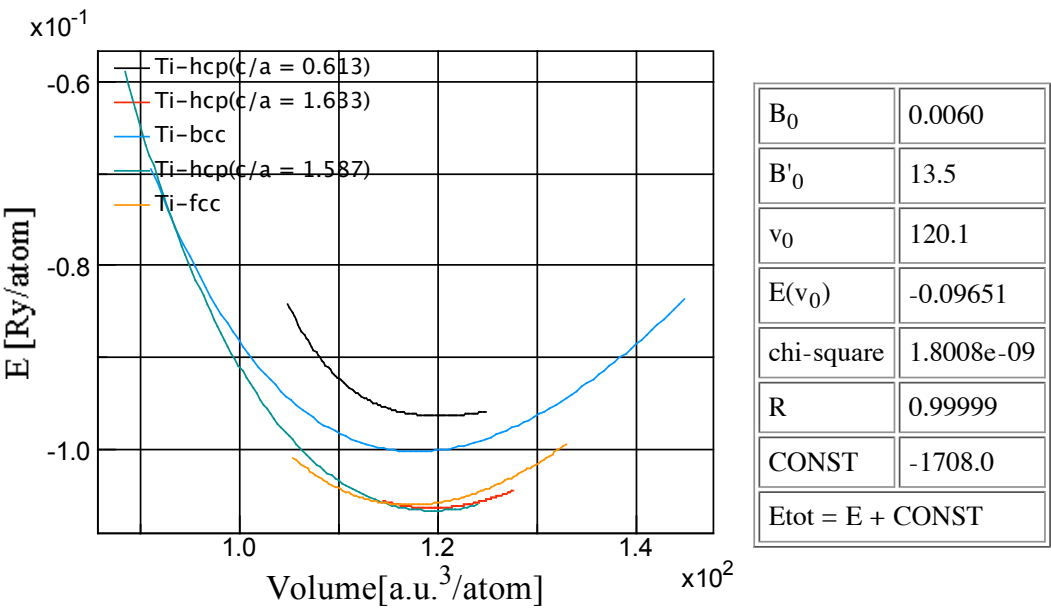
また、bcc-Ti における第一原理計算において求められた値は 1 原子あたりのエネルギーや体積ではなく、ユニットセルあたりのエネルギーと体積であり、これも NIMS のデータと異なり 1 原子あたりの値に統一をしなければならない。このように自ら求めた値の精度を確認するという作業が単位換算や原子あたりの単位の調整が必要であり容易ではなく手間がかかる。

下の図が NIMS の掲載されている bcc-Ti における体積-エネルギーカーブのグラフである。縦軸がエネルギー、横軸が体積で求められている。1 原子あたりのエネルギー、体積である。

右の値は NIMS によって与えられているパラメータである。このパラメータから、下の式にある Murnaghan の状態方程式によって値が求められる。 $B_0$  はエネルギーが最小値をとるときの体積弾性率、 $V_0$  はエネルギーが最小値をとるときの体積、 $E_0$  がエネルギーの最小値である。

Equilibrium properties

No.11 System: Ti, AlB2(C32)/hP3(c/a=0.613), nm



Murnaghan's equation

$$E(v) = \frac{B_0 \cdot v}{B_0 \cdot (B'_0 - 1)} \left[ B'_0 \cdot \left( 1 - \frac{v_0}{v} \right) + \left( \frac{v_0}{v} \right)^{B'_0} - 1 \right] + E(v_0)$$

図 2.5: bcc-Ti の体積-エネルギーカーブ

## 第3章 データ利用プログラム

これらの問題点を解決する改善案となるデータプログラムを説明していく。まず、NIMS の材料データベースに掲載されている bcc-Ti に体積エネルギー曲線を例にとりデータプログラムを説明する。それにあたってまず、材料データベースにある bcc-Ti を求める際に利用する Murnaghan の状態方程式を導出する。次に、そのデータプログラムの説明にはいる。先ほど導出した Murnaghan の状態方程式を利用して得られる bcc-Ti の値と我々が求めた第一原理計算によって求めた値とをグラフによって容易に比較するプログラムの説明をする。最後にこのプログラムを作成した事によって得られたメリットを述べていく。

### 3.1 Murnaghan の状態方程式 [3]

連続体力学の枠組みでは、固体のモデル化に適した状態方程式は自然と理想気体の法則と異なる。固体はある平衡体積  $V_0$  を持ち、その値からすこし増加また減少するとエネルギーは体積の 2 乗で増加する。最も簡単でそれらしい体積に対するエネルギー依存は理想的な固体となる。すなわち

$$E = E_0 + \frac{1}{2}B_0 \frac{(V - V_0)^2}{V_0} \quad (3.1)$$

$B_0$  がエネルギーが最小値をとるときの体積弾性率の値。  $V_0$  もエネルギーが最小値をとるときの体積の値。  $E_0$  はエネルギーの最小値。次にもっともらしい理にかなった形は、不変の体積弾性率をもちいた次の式となる。

$$B' = \left( \frac{\partial B}{\partial P} \right)_T \quad (3.2)$$

体積弾性率は圧力  $P$  を体積  $V$  で微分し、 $-V$  をかけた値で得られる。

$$E = E_0 + B_0(V_0 - V + V \ln(\frac{V}{V_0})) \quad (3.3)$$

より応用された状態方程式は 1944 年に Johns Hopkins 大学の Murnaghan によって導かれた。まずはじめに圧力、

$$P = - \left( \frac{\partial E}{\partial V} \right)_S \quad (3.4)$$



圧力  $P$  はエネルギーを体積で微分しそれを-1 でかけた値となる。  
と体積弾性率

$$B = -V \left( \frac{\partial P}{\partial V} \right)_T \quad (3.5)$$

(体積弾性率  $B$  を圧力  $P$  で微分) とを考えよう。実験では、体積弾性率の圧力微分は

$$B' = \left( \frac{B}{P} \right)_T \quad (3.6)$$

体積とともに少量変化が見られる。もし、私たちが  $B' = B'_0$  で定数となるとすれば、

$$B = B_0 + B'_0 P \quad (3.7)$$

ここで  $p=0$  のとき  $B_0$  の値は  $B$  となる。私たちはこれと (3.8) 式を等しいとおいて、変形すると

$$\frac{dV}{V} = - \frac{dP}{B_0 + B'_0 P} \quad (3.8)$$

となる。この結果を積分する。これらの導出を説明していく。

$$\frac{dV}{V} = - \frac{\frac{1}{B_0} dP}{\frac{1}{B_0} (B_0 + B'_0 P)} \quad (3.9)$$

$V_1$  から  $V_0$  まで定積分する。

$$B_0 \ln \frac{V_1}{V_0} = - \left( \frac{1}{1 + \frac{B'_0}{B_0} P} \right) dP \quad (3.10)$$

$$B_0 \ln \frac{V_1}{V_0} = - \frac{B_0}{B'_0} \left( 1 + \frac{B'_0}{B_0} P \right) \quad (3.11)$$

$$B'_0 \ln \frac{V_1}{V_0} = - \ln \left( 1 + \frac{B'_0 P}{B_0} \right) \quad (3.12)$$

$$B'_0 \ln \frac{V_0}{V_1} = \ln \left( 1 + \frac{B'_0 P}{B_0} \right) \quad (3.13)$$

$$\ln \left( \frac{V_0}{V_1} \right)^{B'_0} = \ln \left( 1 + \frac{B'_0 P}{B_0} \right) \quad (3.14)$$

$$\left( \frac{V_0}{V_1} \right)^{B'_0} = \left( 1 + \frac{B'_0 P}{B_0} \right) \quad (3.15)$$

$$\left( \frac{V_0}{V_1} \right)^{B'_0} - 1 = \frac{B'_0 P}{B_0} \quad (3.16)$$

$$P = \frac{B_0}{B'_0} \left( \left( \frac{V_0}{V_1} \right)^{B'_0} - 1 \right) \quad (3.17)$$

$$P(V) = \frac{B_0}{B'_0} \left( \left( \frac{V_0}{V} \right)^{B'_0} - 1 \right) \quad (3.18)$$

または同等の ( $P$  を  $V$  の式に変換する.)

$$P - \frac{B_0}{B'_0} = \frac{B_0}{B'_0} \left( \frac{V_1}{V_0} \right)^{B'_0} \quad (3.19)$$

$$P - \frac{B_0}{B'_0} = \frac{B_0}{B'_0} \left( \frac{V_1}{V_0} \right)^{B'_0} \quad (3.20)$$

$$\frac{V}{V_0} = \left( \frac{B'_0}{B_0} P - 1 \right)^{\frac{1}{B'_0}} \quad (3.21)$$

$$\frac{V}{V_0} = \left( \frac{B'_0}{B_0} P + 1 \right)^{\frac{-1}{B'_0}} \quad (3.22)$$

$$V(P) = V_0 \left( 1 + B'_0 \frac{P}{B_0} \right)^{\frac{-1}{B'_0}} \quad (3.23)$$

(6) 式を

$$E = E_0 - \int_V^{V_0} P dV \quad (3.24)$$

に代入するとエネルギーの状態方程式に帰着する

積分は  $V$  から  $V_0$  まで定積分する.

$$\int_V^{V_0} P dV = \int_V^{V_0} \frac{B_0}{B'_0} \left( \left( \frac{V_0}{V} \right)^{B'_0} - 1 \right) dV \quad (3.25)$$

$P$  の積分の式の導出

$$\int_V^{V_0} P dV = \int_V^{V_0} \frac{B_0 V_0^{B'_0}}{B'_0} (V)^{B'_0} dV - \int_V^{V_0} \frac{B_0}{B'_0} dV \quad (3.26)$$

$$= \frac{B_0}{B'_0} \left( -\frac{V_0^{B'_0}}{(B'_0 - 1)V^{B'_0}} - 1 \right) \quad (3.27)$$

$$= \frac{B_0 V}{B'_0} \left( -\frac{V_0^{B'_0}}{(B'_0 - 1)V^{B'_0}} - 1 \right) + \frac{B_0}{B'_0 V_0} \left( -\frac{V_0^{B'_0}}{(B'_0 - 1)V_0^{B'_0}} - 1 \right) \quad (3.28)$$

$$= \frac{B_0 V}{B'_0} \left( -\frac{V_0^{B'_0}}{(B'_0 - 1)V^{B'_0}} - 1 \right) + \frac{B_0 V}{B'_0} \left( \frac{1}{(B'_0 - 1)} + 1 \right) v \quad (3.29)$$

$$= \frac{B_0 V}{B'_0} \left( -\frac{V_0^{B'_0}}{(B'_0 - 1)V^{B'_0}} - 1 \right) + \frac{B_0 V_0 + B'_0 B_0 V_0 - B_0 V_0}{B'_0 (B'_0 - 1)} \quad (3.30)$$

$$E(V) = E_0 + \frac{B_0 V}{B'_0} \left( \frac{V_0}{V} \right)^{B'_0} \left( \frac{1}{B'_0 - 1} + 1 \right) - \frac{B_0 V_0}{B'_0 - 1} \quad (3.31)$$

多くの物質では約 3.5 でほぼ一定の  $B'_0$  を持つ。

3 次の等温での状態方程式が, Francis Birch と Harvard によって 1947 年に公表された. これは

$$P(V) = \frac{3B_0}{2} \left[ \left( \frac{V}{V_0} \right)^{\frac{7}{3}} - \left( \frac{V_0}{V} \right)^{\frac{5}{3}} \right] \left[ 1 + \frac{3}{4} (B'_0 - 4) \left[ \left( \frac{V_0}{V} \right)^{\frac{2}{3}} - 1 \right] \right] \quad (3.32)$$

で与えられる. さらに  $E(V)$  は圧力の積分により導かれる.

$$E(V) = E_0 + \frac{9V_0B_0}{16} \left[ \left( \frac{V_0}{V} \right)^{\frac{2}{3}} - 1 \right]^3 \left[ B'_0 + \left[ \left( \frac{V_0}{V} \right)^{\frac{2}{3}} - 1 \right]^2 \left[ 6 - 4 \left( \frac{V_0}{V} \right)^{\frac{2}{3}} \right] \right] \quad (3.33)$$

## 3.2 データプログラム

```
> restart;
> with(Maplets[Examples]);
> file1:=GetFile();
第一原理計算によって得られたデータをファイルから読み込む.
> file1:="/Users/kajimotohidenori/Desktop/Ti3.dat";
```

表 3.1: Ti3.dat. の中身

格子の1辺の長さ (Å)	エネルギー (eV)
12.98031484	-14.392519
13.41781733	-14.615339
13.86504170	-14.803784
15.26611446	-15.177193
16.25073098	-15.285646
16.75853016	-15.30322
17.80564450	-15.27847
18.89549239	-15.163883
20.02892850	-14.989362
21.20680749	-14.763796
23.05882599	-14.393179
23.69931283	-14.255804

```
NIMS によって与えられているパラメータを file から読み込む.
> file2:="/Users/kajimotohidenori/Desktop/Ti3.ctrl";
```

この第一原理計算によって求められた値はユニットセルあたりのエネルギーと体積である. そのため, 1 原子あたりのエネルギーと体積に統一するためにすべての値を 2 で割る.

表 3.2: Ti3.ctrl. の中身

定数	値
$B_0$	0.0079
$B'_0$	3.16
$v_0$	117.78
横軸 (体積) の最小値	80
横軸 (体積) の最大値	180

```
> T:=readdata(file1,2):
> cT:=readdata(file2,1):
> n:=nops(T):
> for i from 1 to n do
> T[i][2]:=T[i][2]/2;
> end do:
```

この下の式が Murunaghan の状態方程式であり、この式で体積-エネルギー曲線を求める.

```
file1 := "/Users/kajimotohiddenori/Desktop/Ti3.dat"
file2 := "/Users/kajimotohiddenori/Desktop/Ti3.ctrl"
E:=V->(B0*V/(B0p*(B0p-1)))*(B0p*(1-V0/V)+(V0/V)^B0p-1)+EV0:
```

file から読み込んだ NIMS で与えられているパラメータを使って値を出力していく

```
> B0:=cT[1]:
> B0p:=cT[2]:
> V0:=cT[3]:
> r1:=cT[4]:
> r2:=cT[5]:
```

得られた値の単位を統一する. これもプログラム内に入力しておく. 我々が求めた第一原理計算での値の単位はエネルギーは eV(エレクトロンボルト), 体積は Å (オングストローム). 一方で NIMS のデータベースで求められた値はエネルギーは Ry(リュードベリ), 体積は a.u(アトムックユニット) で値が求められている.

1 Å=1.89a.u 1Ry=13.6eV

で計算する.

```
> A2au:=1.89:
> eV2Ry:=13.6:
> data1:=T:
```

```

> for i from 1 to n do
> data1[i]:=T[i][1]*A2au^3,T[i][2]/eV2Ry;
> end do:

```

得られたデータを最小二乗法を用いて plot する.

```

> with(stats):
> with(linalg):
> with(plots):
> data2:=convert(transpose(convert(data1,array)),listlist):
> fit1:=fit[leastsquare][[x,y],y=c0+c1*x+c2*x^2+c3*x^3+c4*x^4+c5*x^5,
{c0,c1,c2,c3,c4,c5}]](data2):

```

最後に第一原理計算において膨大な計算量となるために多くの近似値を使っている. 2つのデータを照合するために値の最小値を揃える必要がある.  $x$  について微分してその関数  $f'(x)=0$  になったとき,  $f(x)$  が最小値をとる.

```

> f1:=unapply(rhs(fit1),x):
> EV0:=f1(fsolve(diff(f1(x),x)=0,x=80..180));
EV0 := -.5628745700

> d1:=pointplot(data1):
> d2:=plot(f1(x),x=80..180):
> d3:=plot(E(x),x=80..170,color=blue):
> display(d1,d2,d3);

```

上のプログラムによってデータ精度の確認を自動化した. この自動化プログラムによって得られたグラフは以下ようになった.

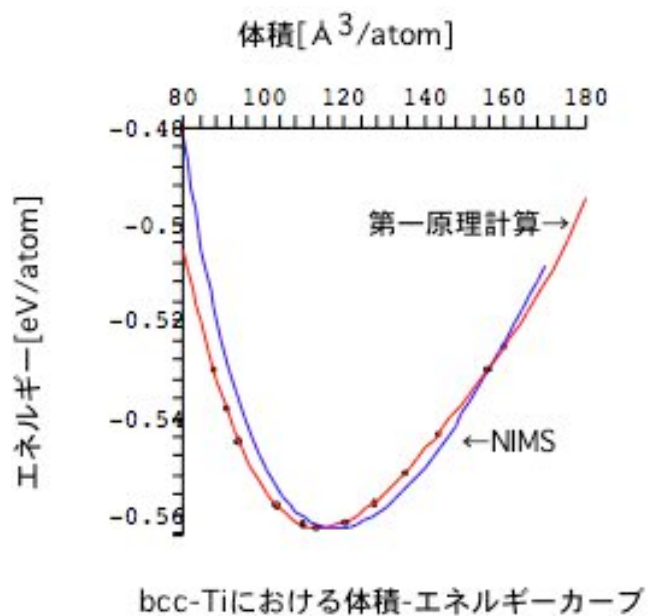


図 3.1: 得られた bcc-Ti における体積-エネルギーカーブ

### 3.3 プログラムの流れ

前節で示した、プログラムを使ってグラフを作成するその流れを図 3.2 で示した。

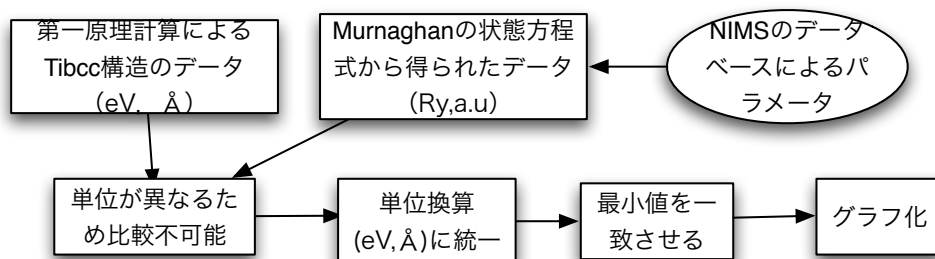


図 3.2: プログラムのワークフロー。

### 3.4 データプログラムの失敗例

上のプログラムを作成する過程には様々な問題が生じた。その中で大きな問題となった2つの失敗例を挙げる。それら失敗例のグラフの描画を下に示す。

#### 3.4.1 失敗例その1

まず一つ目に、単位の調整がうまくいかなかったときの図を示す。それぞれ求めた値の単位を統一した。しかし、第一原理計算で求めた値がユニットセルでのエネルギーと気づく事ができずに、そのまま値を読み込んでしまいグラフを描画してしまった。その失敗例のグラフが下の図である。

以前の利用体系では、このデータが失敗であるとも目で分かるということとは不可能に近い。従来のデータ比較と比べデータの値だけでなく、直接1つのグラフで曲線を描く事で誤ったグラフであると理解できるという事が非常に大きい。

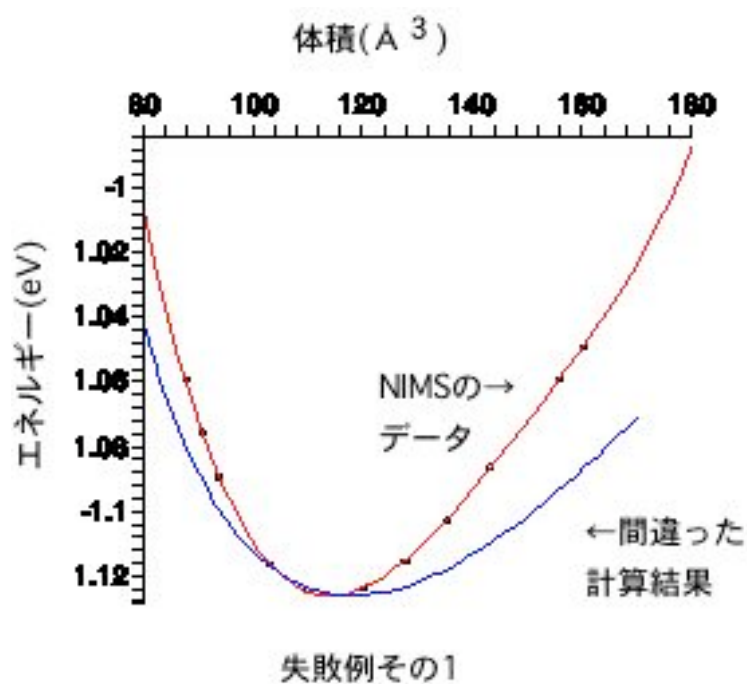


図 3.3: 失敗例その1

### 3.4.2 失敗例その2

2つ目に、それぞれの値の最小値を揃えずにグラフを描画してしまう場合である。第一原理計算では膨大な計算量、原子半径の誤差などから多くの値が近似値を使う。そのために、最小値で互いの曲線を揃えなかった場合グラフを比較できても詳細にまで、比較しにくいという問題点が生じた。

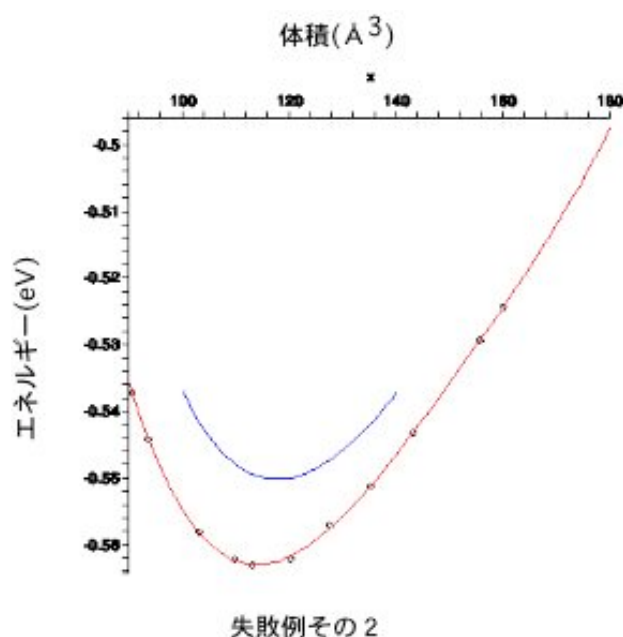


図 3.4: 失敗例その2.

## 3.5 提案システムのメリット

まず、一つ目に、この研究によって、自ら求めた値を入力するだけでデータベースとの比較を1つのグラフ上で自動化する事が可能となった。よって、そのデータの精度を確認する事が容易になった。この描画プログラムは、サーバー側が提供するプログラムとして組み込む事が可能である。また、システムの軽微な修正によって、データの入力部に変更する事が可能であり、そのままデータ収集に利用でき問題点の前者の解決になる。このデータの収集に利用でき、このデータをコンテンツへ組み込む事ができれば、情報の配布力にも繋がる。そして、コストのかかるデータベースの構築が低コストで実現できる。

2つ目にメリットとしてあげられるのは、情報のリアルタイムでの配布力と低コストにある。紙の配布に発達のスピードを規定されてきた制約がなくなった事で



明らかに近年進歩が加速してきている。印刷した本や、紙のような物理的なメディアに代表されるパッケージは変化できない物である。これは昔では十分長持ちしたが、このような物理的な者は変化できず、高コストであるために、よく吟味して創るしかなかった。しかし、インターネットの普及によって知を広める新しい手段が出現し、低コストで情報を配信できる事が可能になった。そのため、吟味する必要もなく情報を発信する事ができる。仮にもし、その情報に誤りがあったとしても CMS のメリットを生かし、新たに情報を更新していく事で修正する事が可能である。情報の共有化を図る上で紙の配布に発達のスピードを規定されてきた制約がなくなった事で明らかに近年、研究の進歩が加速してきている。また、物理的なパッケージには容量の制限があり扱える分野は限られていた。これもインターネットによって制限が限りなくなくなってきたと言えよう。インターネットの出現による範囲、容量と速度の爆発的向上が大きなメリットと言える。

3つ目に、ユーザーによるデータ更新によるデータベース凍結の阻止である。以前のデータベースでは更新があまり行われず、データの信頼性が高いとは言えなかった。しかし、このしくみによって、簡単にページを修正したり、新しい項目を追加できるというメリットがある。この仕組みはインターネットにおける変化を参考にした。現在のインターネットは従来にある書籍などのコンテンツをストックする形からフローする形へ、つまり情報を蓄積するのではなく、更新する形に変化してきた。閉鎖的でパッケージ化された静的なコンテンツから開放的な動的コンテンツへの移行とも言える。これは Wiki, Blog を参考にしている。Wiki, Blog の利点としては多くの人々によってコンテンツを作り上げるコンテンツマネジメントシステム (CMS) と同じ仕組みとなる。また、2つ目のメリットでもあるが、たとえデータの作成の途中の段階であっても、そのデータをユーザが載せておけば、結果を自ら求めなくても別のユーザが結果を求める可能性がある。それにより、研究の進歩が上がる可能性がある。

## 第4章 CMS との対比

これらの提案はCMSを参考にして考えられた。まず、CMSの代表的なWiki,Blogの分析を行う。そのCMSとこれらの改善案のデータベース構築においての比較を行う。CMSの問題点から、予想される問題を挙げていき、それらの解決策を考える。

### 4.1 Wiki,Blog の分析

#### 4.1.1 blog

分析

ブログは本来 weblog と言われるものである。個人や数人のグループで運営され、日々更新される日記的な web サイトの総称である。blog の特徴は自由な投稿が可能であり自分が見つけた記事を人に知られる事である。blog は時系列で表されるため必ず時が記され、また格納庫を自動的に創ってくれるので管理がとてもしやすい。検索エンジンも取り付けられている。

コンテンツマネジメントシステム (CMS) としての側面を重視し、時系列ページの自動生成する機能や他のサイトの記事との連携機能、コメント機能などを備えてブログシステムで運営されている者はすべてブログであるという立場もある。インターネットの普及につれて多くの人が個人の web サイトで日記をつけ始めたが web 日記は紙の日記と異なりその内容が広く一般に公開されており他のサイトからリンクされたり論評されたりする。電子メールなどを通じて著者と読者がコミュニケーションを図ったり特定のトピックスについて電子掲示板で論議する事も容易である。そうした環境の中で web 日記は独自の進化を遂げ新しいメディアとして台頭してきた。

特徴

blog の利点として一番顕著な物は更新の容易な CMS として活用多くのユーザーがいてトラックバックなどで簡単にコミュニケーション可能であるという事である。この利点によって、簡単に記事などの情報を誰もが修正、更新が可能であるまたこれらの情報の整理を容易に行えるように記事コンテンツによる仕分けが自動

で行われる。これにより、情報が蓄積されすぎることによって埋もれるという問題が起こりにくい。

欠点として、この blog の一番の欠点は誹謗中傷など、信頼性に欠けるという点である。情報の信頼性があまりないと情報と言えるものではなくなる。誰もが情報を更新、修正可能である反面、このような問題が生じる。

### 4.1.2 Wiki

#### wiki 概要

Wiki とは Web ブラウザから簡単に Web ページの発行編集などが行える Web コンテンツ管理システムである。複数人が共同で Web サイトを構築していく利用法を想定しており閲覧者が簡単にページを修正したり、新しいページを追加したりできるようになっている。編集者をパスワードで請願したり編集できないように凍結したりする事もできる。また、リンクを簡単に作成できるように独自のルールが定められている。電子掲示板に近いシステムだが Wiki は内容の編集削除が自由であること、基本的に時系列の整理を行わない事から誰もが自由に記事を書き加えていくコラボレーションツールといえる。柔軟性が高く手軽に始められて操作が簡単なことからメモ帳代わりに使ったり簡易なコンテンツ管理システムに利用できる。Wiki は連結されたウェブページの集積で、情報を格納し、修正するためのハイパーリンクシステムといえる。

#### 特徴

wiki の利点としてまず挙げられるのが原理が単純で簡単に使えるということである。これが最大のメリットであると考えられる。また、第三者にも構築できるようにしたものである。作業を途中で中断してもその成果がそのまま残るので作業者が結果を抱え込む事がない。つまり情報共有が容易にでき、その情報の正確性を要求される事なく、提供する事で情報提供者以外の人がある正誤性を判断する事で情報を更新する事ができる。しかも、情報を整理するのに向いている。つまり、情報を探しやすい。情報の更新が誰もが容易である反面その管理者が不透明であるために情報の信頼性というものにかかる。いたずらされる可能性もある。その情報の更新がいつ誰がしたか把握できず、その記録が残らない。その情報更新が誰も見に行かない場合に更新しないという悪循環が生じる可能性がある。

## 4.2 CMS に残された課題

CMS の代表例である 2 つのシステムの分析から、CMS には大きな問題点が 2 つあるとわかる。それは情報の信頼性とデータ更新の動機である。これら 2 つの

問題点とその例を挙げ解決策を考えていく。

#### 4.2.1 情報の信頼性

まず一つ目に、情報の信憑性がある。誰もが情報を更新できるシステムであるため、情報の真贋、根拠がないという点である。正しく書かれた情報がメチャメチャに書き換えられてしまう可能性がある。

##### Wiki における情報の信頼性問題の具体的事件 [4]

まず、第一の事件は、匿名のユーザーによりいたずらが書き込まれたケースである。Robert Kennedy 元上院議員のアシスタントを務めていた人物が、Robert F. Kennedy および John F. Kennedy の暗殺に関与したとする匿名の書き込みを、Wikipedia が4ヶ月間も掲載したのである。同氏は、USAToday 紙に寄稿した記事のなかで、猛烈な非難を Wikipedia に浴びせた。

このような批判は数年前から叫ばれてきている。Wikipedia における膨大な数の項目を処理しきれなくなっているためである。Wikipedia には、これらのページにボランティアの責任者がいるが、この監視者がそのミスを発見するのに困難な状態であったと考えられる。しかも、匿名のユーザーによってこのようないたずらを書き込むケースがある。そのような問題を解決するために、それぞれの責任を持つ Wikipedia の匿名ユーザーによる新規項目の作成を禁じ、登録メンバーだけが作成できるようにした。これまでになかった措置は大きな一歩を踏み出した事になるだろう。誰もが参加できていたサービスが登録メンバーによって Wikipedia の編集が行われる。この行動が、Wikipedia の利用者の減少に繋がる可能性も叫ばれている。

この例は匿名のユーザーによって故意にデータを更新した例である。提案するデータベースにおいては、更新する上でいたずらをするユーザーが多いとは考えにくい。それはこのデータベースがあまり利用者が多いとは言えず、そのような愉快犯がいるとは考えにくいからである。しかし、ユーザーが故意にではなく、正しいと思って誤ってデータを更新してしまう可能性は十分考えられる。このような例とは対照的に偶発的にデータの誤った更新が行われるという問題が浮上する可能性が十分に考えられ対策を考えなければならない。

2つ目は意識的ではないかもしれないケースである。MTV の元 VJ でポッドキャスターの草分け的存在である Adam Curry がポッドキャスティングに関する Wikipedia の項目のなかにあった Technorati の主任エンジニアである Kevin Marks が、2003 年にハーバード大学で開かれた「BloggerCon」で発表した成果に言及する部分を削除した。Curry にとって、自らの行動には利害の衝突は何の関係もなく、同氏はただ内容が不正確に思えたので、それを修正しただけだという。だが、この騒動からは、自分自身あるいは自分が関与したプロジェクトに関する事柄を、

自ら Wikipedia に書き込んだり編集したりする事が許されるのか、という新たな疑問をなげかけている。その事情をよく知っているのはそれに関わった人々だという点が一方にある。がもう一方は、自ら対象となる事柄に関与した人々にとって、その事柄についての記述を編集する場合に中立的になる事が難しい、という点がある。このような問題に対して、自分が関与した事柄についての書き込みや編集は行わないようなルールを作ったとする。しかしそのルールを適用する事が難しい。

この問題に関しても、故意で行われたかそうでないかはわからない。しかし、誤った情報が発信されるという可能性がある限りその可能性を少しでもなくすために問題の解決を図っていかなければならない。

#### 4.2.2 動機 (インセンティブ)

2つ目の問題点は動機である。このデータベースに動機を組み込むかが課題としてある。CMS では Wiki,Blog が代表するように、情報を更新、修正をユーザー自身がおこなう行動が非常に広まっている。これは、システムの中でそのような行動を助長する評価システムが備わっているからであろう。しかし、そのような評価システムが十分に機能しているかどうかの評価はまだ不十分である。

#### 4.2.3 データベース構築システムでの問題点

これら CMS を代表する、Wiki,Blog とデータベースの改善案の比較をする。CMS の最大のメリットは第三者のユーザからデータベースを構築できるという点である。このデータベースに第三者からデータを提供する事で、データが古くデータの更新、修正が必要な NIMS のデータベースの問題解決となる。また、NIMS のユーザは多いとはいいいない。しかし、CMS の爆発的な流行はこのシステムの導入によってユーザの増加が期待できる。

しかし、データを更新、修正する際には正確性が要求される。この Wiki,Blog に関しては正確性を要求して構築されたシステムではない。多くのユーザによって情報が更新され続ける事で正確な情報に収束するというのは曖昧である。そのため、このシステムがデータの値が最も重要であるこの NIMS のデータベースにおいて最適であるかは今後十分に吟味しなければならない。

さらに、既存の CMS において機能している動機 (インセンティブ) を誘導している評価システムが、ユーザからのデータの更新、修正を行うシステムに適合しているかは分からない。プロは見返りのない事はしないという可能性もある。データベースの更新にどのようにしてインセンティブを高めるかが今後のもっとも重要な課題である。

## 第5章 まとめ

本研究では、NIMS の計算物性データベースの bcc-Ti の体積-エネルギー曲線を例にとり、既存のデータとユーザが得られたデータとの比較を容易にできるグラフ作成スクリプトの構築を試みた。このスクリプトによって、データが1つのグラフによって比較できるために、ユーザが得たデータの妥当性が一目瞭然となる。

また、データベースが凍結しているために、データ量が少なく、古いデータであったり、信頼性があまり高くないデータが掲載されていた。しかし、ユーザがデータを得た際に、このデータベースにデータを直接入力できるシステムを構築する事ができれば、データベースの活性化に繋がる。

本研究で得られたスクリプトを用いれば、データの比較が容易にでき、それに加えユーザからのデータ提供によるデータベース構築という2つの大きなメリットがある。それによってデータベースが活性化され、非常に価値の高いデータベースが構築されることが期待される。

## 付 録 A

### A.1 「知」の創造にシステム革命, 坂村健 (日本経済新聞 2005 年 (平成 17 年) 8 月 26 日, 朝刊)

[2]

解放系で進化持続信頼性向上で新たな「権威」をストックからフローへ変換『電車男』が関心を集めている「2ちゃんねる」という世界に類を見ないインターネットの巨大掲示板で、オタク青年が不定期に発信する魅力的な女性との実時間の苦闘の交際報告である。その実話かどうかは定かではないテキストに反応して、書き込まれるネットのなかの大量にのぼる支持者からの助言。そのテキストの集合体を、編集役の「まとめサイト」が整理したものが「電車男」という純愛コンテンツとなった。限られた（閉鎖的な）人間がつくりパッケージ化されて配布される従来型書籍などのコンテンツ（情報の内容）をストックとするなら『電車男』は2ちゃんねるという開放的な場のなかで不特定多数の人々が読みながらつくり上げた、まさにフローすることで生まれたコンテンツである。閉鎖的でパッケージ化された静的なコンテンツから、開放的な場による動的なコンテンツへ。知がストック型からフロー型へ移行するという流れがインターネットのなかで見えてきた。同じ流れにあるのが最近はやりの「ブログ（日記風の簡易型サイト）」である。有名人のブログなどが雨後のたけのこのようにできるとか、商品開発に利用できるとか話題性もあることから「ブログを使ったビジネス」などの見出しが経済誌を飾るほど認知されるようになってきている。しかし、その背景にある本質を見るには『電車男』を生んだ2ちゃんねるもブログもフロー型の「知の創造システム」として考えるほうがいい。ネットワークの分野で重要性が近年認識されているこうしたシステムを総称して「CMS (Contents Management System)」と呼ぶ。CMSとは多くの人々の集団でコンテンツをつくり上げる活動を助ける（または、その活動を定型化するシステムの総称である。しかし、その本来の定義であればデジタルはCMSの本質ではない。最も古く、成功したCMSは「科学」だからだ。科学とは、学会、査読、論文誌、博士課程などさまざまな制度により、よりよいコンテンツを生み、また更新を続けている終わらないプロセスである。とはいえ、ストックが無意味になりつつありフロー主体へと知が明確に移行してきていることには、インターネットが大きく関係している。印刷した本のような物理的なメディアに代表されるパッケージは変化できない。というより変化しない

ものがパッケージである。しかしかつてはそれが十分長持ちした。一つの仕事に人の一生よりも時間がかかることも多く、科学でも電磁気学で欠かせないグリーンの定理、ウェゲナーの大陸移動説など、生前は無視されたのに死後評価された例は多々ある。スピードが遅いから方便としてのパッケージが成り立っていたのだ。本のような物理的メディアは変化できず、高コストだから吟味してつくるしかなかった。そこにインターネットが普及して「ウェブ」という体系化した知を広める新しい手段が出現したのだ。その特徴はリアルタイム、かつ低コストでの全世界への知の配布力にある。紙の配布に発達のスピードを規定されていた「科学」というCMSは、その制約がなくなったことであきらかに近年進歩を加速させている。また、知の連関範囲の面でも、従来の物理的パッケージは容量の制限があり、扱える分野は限られていた。しかし、近年学問の世界では同じ分野の専門家同士でも互いの研究内容が把握できないほどの専門化と学際化が同時進行している。これも可能にしているのも、自己組織的な知の連関の広がりをサポートし、他の専門の関する知識でも検索で一瞬で引き出せるというインターネットの力が大きい。そしてこのようなインターネットの性質がネットワーク自体を進歩させる正のフィードバック効果を生み出す。インターネットの出現による範囲と速度の爆発的拡大 向上。それにより科学の分野では、パッケージとはフローの単なるスナップショット（一断面）にすぎず、その方便がもはや成り立たないことが明確になってしまったのだ。

#### 評価高い人の権限を強める

知には完成形はない。間違いもあるし、何が正しいかわからないことも多い。信用できるのは結果としての「知」ではなく、それを生み出すプロセス、つまり十分な時間があればより「正しい」ものに近づくことを統計的に期待できるシステムである。それをよりよく設計することしかできない。「科学」はまさにそのプロセスの成功例だ。プロセスの設計とは制度の設計である。インターネットとパソコンの普及によりそのプロセスの外部化が可能になり、様々な検査サイトや評価サイト、ブログや2ちゃんねるなどの場で、各種の制度（システム）のアイデアがインターネットの規模とスピードで日々試みられている。たとえば、最も過激なウィキ（ウィキ）」と呼ばれるシステムは、誰でも内容を書き換えられるホームページである。このウィキの技術を使って、百科事典をつくろうという「ウィキペディア」というプロジェクトもある。すでに英語版で六十万件以上、英語を除く他の諸言語の版で約百万件以上の項目記事が執筆されている。当然、誰でも自由に書き込みができるために情報の信ぴょう性やその文責は保証の限りでない。正しく書かれた項目を、どこかのイタズラ者がメチャメチャに書き換えてしまう危険性もある。しかし同時に、多くのユーザーに開かれているので改悪する人より改善する人が多ければいいという考え方もできるこれを前提にしたウィキのコンセプトは「間違いを犯すことを難しくすることよりそれを直すのをやさしくする」というものである。そのコンセプトでウィキ自体もオープンソース（誰でも改変が可能）であり、様々な改良のアイデアが与えられ、手直しされながら使われて



いる。そこで試されている機能はまさに、制度設計をシステム化した部分だといえる。改悪ばかりする人をはじくとか、評価の高い改善を選択し、そういう書き込み人の「権限」をシステム化している。近年米国などで議論になっている、ブログとマスコミの対抗関係なども同様の文脈でとらえることができる。マスコミがブログジャーナリズムに対して指摘する信頼性の問題に対応するのにも「権威」のシステム化が必須だからだ。

#### 参加の誘因含め制度設計を促進

ウィキも CMS もまだまだ完成したものではない。「権威」の問題以外にも現実世界でものをいう給与や身分保障といったもの、すなわち改良などに参加して「知」の進化に取り組む人々の「インセンティブ（誘因）」をどうネットのシステムに組み込むかなど課題は山積みである。たとえばある学会でウィキペディアに積極的に改善の書き込みをしようといった運動も起きたが、プロは見返りのないことはしないということなのか、広まらなかったという。とはいえ、一度工学の対象となったシステムは遅くても着実に改善される。「信頼性」の問題についても書き込み人の同定、特定の IP(インターネットプロトコル) アドレスからの書き込みの禁止処置、書き込み人のレーディング（格付け）、内容に対する多数的レーディングなど、さまざまな技術的な試行が進んでいる。いままでの、あいまいだった「権威」に明示的に裏づけを与え、そういう制度設計をすぐにシステムに反映させて試せるのが CMS だ。新たに有効な「権威」や「インセンティブ」をどう設計し、CMS のプログラムに反映させるのか。その終わりのないカイゼンこそがインターネット時代の「情報資本主義」の本質なのである。

## A.2 材料情報データ, 情報の取得と発信, 山崎政義, 材料基盤情報ステーションデータベース研究グループ

[1]

高品質な基礎データの例としては国際学術連合会議 (ICSU) の科学技術データ委員会 CODATA (Committee on Data for Science and Technology of the International Council for Science) に設置された基礎定数作業部会 (Task Group on fundamental Constants) によって「基礎物理低数が1999年末に十数年ぶりに大幅改訂され公表された。なお、日本での対応機関は日本学術会議 CODATA 部会および情報知識学会 CODATA 部会である。我が国では有機化合物のスペクトルデータについて独立行政法人産業技術総合研究所がデータベースを公開している。NIMS の基盤原子力材料データベースに核データが、また、結晶構造データベース (Pauling File), 計算物性データベースに結晶構造情報および状態図が含まれている。このような分野のデータ活動については同様の作業に重複を避けて、国際連携による効率的なデータベース構築を行い、世界中で使われる公共財として整備する事が大事である。

基盤的工学データおよび情報は材料開発に携わる研究者、技術者ばかりではなく機器の設計者にとっても必要不可欠である。基盤的工学データは材料設計および各種シミュレーションを行う際のデータとして用いられる。また、機器設計のための材料選択および材料選択および材料の最適利用のためにも利用される。基盤的工学データは素材メータのカタログを収集し、データベース化して発信しているものと、試験研究機関で材料試験した測定データあるいは学術文献から採取したデータをつくったデータベースを構築したものがある。そのため、基盤的工学データは特性値ばかりではなく材料の製造プロセス、測定機器、試験材料の形状、寸法、試験条件、および試験機関などの情報を含むデータベースを構築しなければならない。しかし、このように系統的で計画的にデータを取得し、データベースを構築して公開している例は世界的にもなく、NIMS の構造材料データベースのクリープ、疲労、腐食、および宇宙関連材料強度データだけである。素材メーカのカタログを発信しているもので世界最大のデータベースは米国の MatWeb であり、アクセスも16000人/日とよく利用されている。ヨーロッパでは伝統的に出版社によるハンドブックやデータブックの発刊が主流であるが、最近はそれらの CD-ROM 版も作成されている。構造材料に関するデータベースとしては JRC (European Commission Joint Research Centre) が EU 各国のデータを取りまとめ発信している。

物質、材料データベースはデータの信頼性 (質) が最も大事であるが、データの網羅性 (量) も必要である。さらに、データベースはデータの蓄積ばかりではなく、利用者が必要とするデータや情報をできるだけ速やかに表示する検索する機能を兼ね備えていなければならない。しかし、一機関が発信できるデータの量や情報には限度がある。そこで、インターネットで公開されている世界の物質、材料データベースをつなぎ、各データベースが発信しているデータの量を材料のカテゴリ

(Ceramic composite, Fiber & Particulates Foam, Metal, Natural and Polymer)  
別に検索可能な MATDATA.net を英国の Granta Design 社が開発し公開している。

従来のデータベースは開発者のグループのみが利用し、研究開発期間が終了すると予算もなくなり、データの追加もなく消滅してしまう物が多かった。データベースは利用者のニーズを把握し、継続的にデータを蓄積していなければならない。

## 引用文献

- [1] 物質材料研究アウトルック 2005 年度  
山崎 政義  
独立行政法人 物質材料研究機構 2005  
P215
- [2] 日本経済新聞 2005 年 (平成 17 年)8 月 26 日, 朝刊  
坂村健著
- [3] Birch-Murnaghan equation of state  
[http://en.wikipedia.org/wiki/Birch-Murnaghan\\_equation\\_of\\_state](http://en.wikipedia.org/wiki/Birch-Murnaghan_equation_of_state)
- [4] Wikipedia は果たして「オープンソース」なのか  
<http://japan.cnet.com/special/story/0,2000050158,20092803,00.htm>