

## データベース構築の位置づけ

吉原一紘

(会長)

金属材料技術研究所

305 つくば市千現 1 - 2 - 1

今回の JSA に鈴木さんの「材料別分科会とデータベース構築との関わりについて」というコメントが掲載されています。鈴木さんは 4 つある材料別分科会の中で、電子材料グループの幹事として重責を果たしておられますが、このコメントの中で鈴木さんが材料別分科会のミッションは必ずしもデータベース構築とはリンクしないと指摘されておられます。この指摘がなされた背景には、表面分析研究会において、データベースの位置づけが明確でないという点にあるのではないかと思います。

表面分析研究会は 1985 年に VAMAS 活動を行うために設立された VAMAS-SCA-Japan 委員会を母体としています。およそ 10 年の活動を通して、我々はデータ取得法やデータ処理の標準化、データの共有化を目指した議論をしてきました。しかしながら、必ずしも最初からこのような明確な目標は持っていなかったように思います。また、最初のうちは「標準化」や「共有化」はあまり「科学」とは関係ないと思っておられる方が多かったように思いましたが、今では、一村さんが JSA, 1 巻 3 号の巻頭言に書かれているように、標準を考えることは正確なデータを再現性よく取得する方法を考えることだという認識が作られ、後藤先生の仕事に代表されるように、標準化に関する仕事は基礎科学の基本であるということが我々の共通の理解になってきたのではないかと思います。

データを共通で評価しようというときには、データの構造を共通にしなければなりません。今では、いわゆる NPL フォーマットも共通フォーマットして認識され、ISO にまで提案されて

いますが、これとても 1989 年の 7 月の NKK 熱海寮における会議で夜を徹しての議論から始まりました。また、データ取得法の標準化に関しても最初は Cu を用いた CMA の焦点あわせの議論から始まっています。このように今では当然と思える手順もメンバーの熱心な議論から始まっていますが、当時この議論に加わっていたメンバーの方もこれらの議論の結果が今後どのように発展していくかに関しては、必ずしも明確なビジョンは持っていなかったように思います。ただ、共通の課題に関して夜を徹しての議論が楽しく、交流関係が築けるのが良かったのかもしれない。現在では、このような議論の場を提供しているのが材料別分科会であり、研究会の発展にとって最も重要な存在であると思います。鈴木さんがコメントの中で述べられているように、この研究会は旧来の学会のような官僚体制ではありません。この研究会は「思いつけば何でもやる。理屈は後から付ける。」という点に特徴があります。したがって、材料別分科会の目的をクリアにするということも重要かもしれませんが、材料別分科会の議論の中で新しい「思いつき」が生まれ、それから分科会の「目的」が作られても良いのではないのでしょうか。

さて、本論のデータベースの位置づけについて述べなくてはなりません。ここまで拙文を読んでいた方にはもう既におわかりかと思いますが、データベースの構築もまさに思いつきの議論から生まれました。せっかく共通フォーマットにまでしてラウンドロビンのデータ処理のために集めたデータを無駄にすることはないということです。そこで、Common Data Processing System というソフトウェアを作り、その中にデータベースを組み込んだのが始まりです。その後、データベースのあり方に関して、標準スペクトルのみを集めた「小さなデータベース」を目指すか、あるいは、あらゆる物質をあらゆる条件で取得したスペクトルをグレード付きで集めた「大きなデータベース」にするか

という議論が始まり、関根さんが1991年のISPRAM 91会議で通信回線を利用した「大きなデータベース」に関する提案をされました。このような議論が始めにあったために、1994年に科学技術庁でインターネットを用いたデータベースに関する研究の募集があったときに、「大きいデータベースの構築」を目指した表面分析データベースの提案を行うことができました。幸いにこの提案は採用され現在に至っています。このプロジェクトを実行することにより、表面分析研究会は独自のサーバーを持ちホームページが開け、データベース以外にもインターネットでJSAの内容や、会合のアナウンスメントの情報が得られるという、情報社会を先取りした最も先端的な学会となっています。

「大きなデータベース」は会員の方々のご協力がなくては作れません。材料別分科会の共同研究や討論の成果がデータベースという形に生かされていくことも重要なことだと思います。もちろん鈴木さんが指摘したように材料別分科会の仕事はデータベースを作るためにあるわけではありません。ただ、研究会としてこれまでに目指してきた「データの共有化」活動の成果をデータベースという形に残すということです。あらゆる物質をあらゆる条件で取得したスペクトルを集めるということは容易ではありませんが、どんなスペクトルでも、取得条件がきちんと記述してあればデータベースのデータになるはずで、そのようなスペクトルを集めたデータベースは、実際の作業現場で取得されたデータを解釈するときに参照され、組成の同定や、スペクトルの異常原因の究明などに使用されるはずで、表面分析研究会の作成したデータベースを組み込んだAI（人工知能）表面分析装置が市販されることを想像することもおもしろいとは思いませんか。データに関するすべての情報を正確に伝えるということこそ科学の基本であると思います。我々は、データベースの構築という作業の過程で科学の基本を理解していくことになるでしょう。

繰り返しますが、表面分析研究会には官僚組織はありません。会員の中で気楽に夢を話し合っているうちに思いつきが生まれたら、やる気さえあれば必ず実現できるというのがこれまでの10年間の経験です。JSAも、思いつきで生まれたものですが、幸いに田沼さんを始めとする編集委員会がボランティア精神でがんばっているために発行が続いています。一村さんが巻頭言でも述べられているように、この研究会は会員一人一人が牽引車です。どこにもトップダウンの目標などはありませんし、これでなければならないということもありません。会員一人一人が研究会の目標を作るつもりで積極的に議論に参加され、研究会を盛り立てていくことを期待します。