



材料に関するファクトデータベース活動の 現状と将来

小野寺 夏生*・愛宕 隆治*

Present Status and Future of the Activities on Material Databases

Natsuo ONODERA and Takaharu ATAGO

1. はじめに

情報をコンピューター可読ファイルの形に編成し、いろいろの目的に利用可能とした情報集合体をデータベースと呼ぶ。情報処理・通信の技術の進歩に伴って、多くの情報に対して多様で迅速な処理（検索、編集、加工、計算、解析など）ができるようになり、そのための素材としてのデータベースへの関心がようやく高まりつつある。特に、利用者が遠隔の地からデータベースシステムを呼出し、システムと会話をしながら必要とする情報を即時的に得ることのできるオンライン情報サービスが日常的なものになったことが、この普及に貢献している。

公開されているデータベース（利用者の資格に一定の制限を設けているものも含めて）は、世界で 2000 以上を数えているが、科学技術の分野では、大規模で著名なデータベースの多くは、学术论文・特許・レポート等の文献の標題・抄録・キーワード・書誌事項等を収録した、いわゆる文献データベースである。これに対し、測定・観測・理論・評価等から得られるデータを直接収録したファクトデータベースは、数でこそ文献データベースに匹敵するものの、規模が一般に小さく、特殊な利用分野に限定されたものが多い¹⁾。しかし、この種のデータベースをより大規模化・統合化して、情報の利用の高度化を図ることが、科学技術の役割が増大しつつある今後の社会にとって重要な問題となろう。ここでは、ファクトデータベース全体の状況、その整備の必要性和問題点等の議論は別稿²⁾にゆずり、先端技術の代表の一つとされる材料の分野におけるファクトデータベースの現状と今後の方向を概観するが、筆者の知識不足により極めて表面的記述に流れていることをお許しいただきたい。なお、商品としての材料の生産・消費・規格等のデータベースも重要であるが、筆者の調査不足により、本稿では、物理的・化学的性質に関するデータベースを主な対象としている。

2. 材料に関するファクトデータベースの概況

公開されているデータベースに関して、いくつかの著名なディレクトリーが出版されている^{2)~4)}が、材料の性質のデータベースを対象を限定して、かなり整備されたディレクトリーが最近出された⁵⁾。このディレクトリーは、ローレンス・リバーモア研究所に置かれている TIS (Technology Information System) において、外部のいろいろなデータベースを利用する時のオンラインガイドとすることを意図して作られたものである。

このディレクトリーの概要の説明により、材料に関するデータベースのおよその状況が把握されるであろう。

(1) このディレクトリーには、116 のファクトデータベースと 23 の文献データベースが収録されている。ただし、ファクトデータベース中心の調査であり、文献データベースは網羅的でない。ファクトデータベースの中には、推算や解析のためのプログラムパッケージも含まれている。

このほかに、質問票に対して回答が未着のデータベース 15 もリストされている。

(2) 文献、ファクト合わせて 139 のデータベースは約 90 の機関により作成されている。ファクトデータベースの作成機関は 80 弱である。

(3) 116 のファクトデータベース中オンラインで利用できるものは 77 である。他は磁気テープや印刷物の購入、検索の依頼等により利用できる。

(4) 116 のファクトデータベースについて、作成機関の国別、及び対象とする性質の分野別の分布を表 1 に示す。米国で作られたディレクトリーということも考慮しても、米国の優位は圧倒的である。なお、分類中の、原子の性質、分子の性質、化学的性質に属するデータベースには、CAS のレジストリファイルのような化学構造データや、赤外・NMR・質量スペクトルのような分

昭和 60 年 4 月 24 日受付 (Received Apr. 24, 1985) (依頼展望)

* 日本科学技術情報センター (The Japan Information Center of Science and Technology, 2-5-2 Nagata-cho Chiyoda-ku, Tokyo 100)

表 1 材料の性質に関するファクトデータベースの国別・分野別統計

	性 質 の 分 野												計	集計時 までに回 答のなか つたもの
	原子の 性 質	分子の 性 質	結晶 構造	組織	熱物理 的性質	化学熱力 学的性質	機械的 性 質	光学的 性 質	電氣的 性 質	磁氣的 性 質	化学的 性 質	環境		
オーストラリア					1		1				1		1	
オーストリア	4												4	
ベルギー						1							1	
カナダ	1		1		1	2	1				1		5	
チェコスロバキア														1
西ドイツ	1		1	2	3		3				1		9	1
フランス				1	1						2		3	3
イタリア														1
日本	2	2	2	1		2	1		3		2		9	
オランダ	1			2		1	1				1		4	
ノルウェー							1						1	
ポーランド														2
英国	2	1	1		3	3	3		1		1		12	4
米国	9	7	4	2	9	9	20	1	2	1	20	5	67	1
ソ連					1								1	3
ユーゴスラヴィア				1			1				1		2	
計	18	9	8	8	19	17	32	1	6	1	30	5	116	15

一つのデータベースが複数の性質に分類されていたり、2 国間の共同で作成されたりすることがあるため、縦横ともに合計値は単純和と合わない。

表 2 結晶構造のデータベース

項番	データベース名	対象材料	データの内容	作成機関	日本での利用
1	CRYSTMET	金属, 金属間化合物	原子座標まで含む	CISTI (カナダ)	オンライン (直接), MT 購入
2	ICSD	無機物質 (30 000)	同 上	ボン大学 無機化学研究所 (西独)	オンライン (INKA), MT 購入
3	CCDF	有機化合物 (35 000)	同 上	ケンブリッジ大結晶 データセンター (英)	オンライン (CIS, 東大), MT 購入
4	PDB	蛋白質, 核酸, 多糖 (240)	同 上	ブルックヘブン国立研究所 (米)	オンライン (阪大), MT 購入
5	Crystal Data Identification File	結晶一般 (60 000)	格子定数, 空間群, 密度	JCPDS/NBS (米)	MT 購入
6	PDF-JCPDS	無機・有機物質 (42 000)	粉末回折データ	JCPDS (米)	MT, ハードコピー購入

子構造同定用データのように、いわゆる材料データとはやや趣の異なるものも含まれている。

3. 稼働中の主なデータベース活動

上述のディレクトリーに収録されているファクトデータベースを、いくつかの代表的なジャンルにまとめ、以下にそれらの主要な活動を紹介する。

3.1 結晶構造のデータベース

この関係の主なデータベースを表 2 に示す。

結晶構造の最も詳細な情報である原子座標や温度因子まで含んだデータベースには、CRYSTMET (金属), ICSD (無機物質), CCDF (有機化合物), PDB (生体高分子) がある。材料研究の観点から関心が高いのははじめの二つであろう。上記以外のデータベースは、格子定数や粉末回折データのみを含み、主に分析・同定の目

的に利用される。

国内では、日本科学技術情報センター (JICST) が科学技術庁無機材質研究所の協力を得てデータベース作成を開始することになっている (4.3 参照)。

3.2 熱力学的性質

熱物理的・熱化学的な性質に関するデータベースはかなり多数存在するが、これらの過半数は、主に石油化学工業における精製・分離等のプロセスの設計への利用を意図したものである。従つて対象物質は炭化水素等の低分子有機化合物が主である。表 3 にはこれらのものを除き、固体材料の観点から興味あると思われるものをまとめた。

JICST の熱物性データベースは、無機・有機あるいは気体・液体・固体の別なく、広い物性範囲のデータを収集し、その基本的利用機能を提供することを目標に、現

表 3 熱物性関係のデータベース

項番	データベース名	対象材料	データの内容	作成機関	日本での利用
1	AVESTA	無機・有機物質 (2000)	40 種の物理的・化学的性質	VNII (ソ)	
2	CHETAH	有機・有機金属化合物	理想気体の熱容量, エントロピー, エンタルピー	ASTM (米)	MT 購入
3	CIMPP	工業的化学品 (300)	50 の熱物性	ウェスタン・オンタリオ大 (カナダ)	MT 購入
4	DETERM-SDC	純物質 (550) とその混合系	熱物理的データ	DECHEMA (西独)	MT 購入
5	DETERM-SDR	純物質 (3000)	熱力学・輸送・相平衡データ	同 上	MT 購入
6	F*A*C*T	無機化合物 (3200)	化学平衡・相平衡の計算のための熱力学データ	Royal Military College of Canada	オンライン (直接)
7	JANAF	主に無機物質 (1000)	6000 K までの熱容量, エントロピー, エンタルピー, Gibbs エネルギー等	Dow Chemical Co. (米)	MT 購入
8	MTDATA	無機物質, 水溶液中化学種 (2500)	熱容量, エントロピー, 生成熱	NPL (英)	オンライン (直接) MT 購入
9	THERMO	無機物質 (15000)	標準状態での熱容量, エントロピー, エンタルピー, Gibbs エネルギー	NBS (米)	オンライン (CIS) MT 購入
10	THERMODATA	金属・無機物質 (2000)	熱化学データ	Thermodata (仏)	オンライン (直接)
11	Thermophysical Properties of Helium	ヘリウム	熱物理的データ	NBS (米)	MT 購入
12	Thermophysical Properties of Hydrocarbon Mixtures	炭化水素 (60)	同 上	同 上	MT 購入
13	Thermophysical Properties of Six Fluids	エチレン, Ar, O ₂ , p-H ₂ , N ₂ , NF ₃ の流体	同 上	同 上	MT 購入

在開発中である⁶⁾⁷⁾。

3.3 金属材料の機械的及び化学的性質に関するデータベース

主なデータベースを表4に示す。

鉄鋼技術に関する先進国である我が国では、科学技術庁金属材料技術研究所のクリープ試験及び疲れ試験のデータシートや、日本鉄鋼協会の金属材料高温強度データ集のような優れたデータ集が出版されているが、機械可読のデータベースとはなっていない。ただし、大手の鉄鋼メーカーや重機械メーカーでは、内外のデータをもとに社内データベースを作り、活用しているようである。

JICST では昭和 60 年度より金材研と共同して同研究所のクリープ、疲れデータをデータベースとする作業に取り組み、徐々に金属材料データベースとして充実していく考えをもっている (4.3 参照)。

3.4 電子材料・高分子材料のデータベース

これらについては金属材料ほど多数ではないが、それぞれの材料に関心の深い性質を扱った表5のようなデータベースがある。

このうち EMIS は、物理・電気・情報分野の文献データベースの作成機関として著名な IEE-INSPEC が作成しており、単に半導体材料の物性データや商品データの供給のみならず、最新の研究成果を迅速に公表させるという「電子雑誌」の役割をも意図しているという点で特徴的である⁸⁾。

3.5 原子炉設計に関連した性質のデータベース

この関係のデータベースは次の2種に大別される。

(a) 原子核の衝突・反応・崩壊などに関するデータを扱ったもの

(b) 原子炉材料の物理的・化学的性質に関するもの
これらを合わせて表6に示した。原子炉材料は多く金属

表 4 金属・合金の材料特性に関するデータベース

項番	データベース名	対象材料	データの内容	作成機関	日本での利用
1	BOLTS	ベース金属 (80 種, 770 ヒット)	4 種の機械的性質	Materials Research and Computer Simulation Corp. (米)	オンライン (直接)
2	CASIS	高硬度鋼	高硬度化と、圧延・焼入れ・ 焼もどし等の処理に関する性質	Minitech Ltd (カナダ)	MT 購入
3	CDC	鍛造合金 (350), 鋳造銅合金 (120)	機械的, 物理的, 電気的, 金属学的, 及び腐食データ	Copper Development Assoc., Inc. (米)	オンライン (直接) MT 購入
4	Corrosion	合金 (20) プラスチック (26) ゴム (13), ガラス	600 種の腐食剤 (酸, アルカリ, 塩) に対するデータ	Marcel Dekker, Inc. (米)	オンライン (SDC)
5	CUTDATA	合金, 非金属材料 (60 グループ)	切削加工に関するデータ	Metcut Research Assoc., Inc. (米)	MT 購入
6	DETER	合金 (90), プラスチック・ ゴム・セラミックス (60)	大気や水溶液中での 化学的酸性	USA Armament R&D Center	MT 購入
7	DTDATA	ステンレス鋼 (16), 合金鋼 (27), 非鉄合金 (59)	破碎, き裂に対する 強さ	デイトン大 (米)	MT 購入
8	EDEAC	低合金鋼, ステンレス鋼, 低炭素鋼	疲れき裂伝ば, 歪み速度, 応力腐食のデータ	電力研究所 (EPRI, 米)	オンライン (Battelle)
9	HTM-DB	高 Fe 超合金	15 の機械的性質	EC 委員会	オンライン (直接)
10	INFOS	鋼 (112)	金属加工に関するデータ	Laboratorium für Werkzeugmaschinen und Betriebslehre der RWTH (西独)	オンライン (直接) MT 購入
11	MDF/I	合金	機械的及び物理的性質	ASM (米)	オンライン (SDC)
12	PVS	ベース金属 (200 種, 2600 ヒート)	引張り及び疲労に関する データ	Materials Research and Computer Simulation Corp. (米)	オンライン (EPRI の承認による)
13	STEEL- FACTS/S	西独規格による鋼 (1000), 米国規格も開業中	規格に定める組成, 機械 的・磁気的性質等	Betriebs forschungs- institut	オンライン (直接)
14	STEEL- FACTS/T	鋼 (500)	室温及び高温における 機械的・物理的性質	同 上	
15	ZLC	Zr, Pb, Cd の 合金と化合物	機械的性質	Zinc Development Assoc. (英)	オンライン (直接)

なので, (b)のタイプに属するデータベースには 3・3 に分類してもよいものが多いが, 原子炉設計用を意図したものはここに含めた. 表からも分かるように, この分野のデータベースは, 国際原子力機構 (IAEA) が中心となつて国際協力により作られているものが多く, 日本も応分の貢献をしている.

3・6 材料の総合的なデータベース

多数の材料について広範なデータを網羅した総合的データベースとしては, パーデュー大学にある CINDAS (The Center for Information and Numerical Data Analysis and Synthesis) が作成するものが代表的である⁹⁾.

CINDAS は, 技術的に重要な材料に関する熱物理的・熱放射的・電子的・電気的・光学的・磁気的な 36 の物性をカバーしており, これまでに, これらに関する 250 000 の文献の文献データベースを蓄積している (毎年 10 000 件を追加). これらの中から抽出したデータについて厳密な評価・相関づけ・加工を行い, materials properties データベースを作成する. これまでに 75 000 種の材料につき 100 000 系列のデータを蓄積している. さらに, これらの物性に加え, 燃焼・環境・健康等の観点から見た危険性, 耐性, 用途, 製造方法, メーカー, 価格等の情報も含めた materials データベースも作成している. しかしながら CINDAS のデータベースのコ

表 5 電子材料及びプラスチック材料のデータベース

項番	データベース名	対象材料	データの内容	作成機関	日本での利用
1	EMIS	半導体を中心とする 電子材料(27)	Si, GaAs, InP, LiNbO ₃	IEE・INSPEC(英)	オンライン (GEHMARKⅢ)
2	CAMS	化合物半導体, 超電導体	材料設計のための電子的 物性	電子技術総合 研究所(日)	
3	COMPAT	金属・プラスチック 接着材・セラミックス 等の材料(719), 火薬・推進薬・爆薬等 のエネルギー剤(585)	短期及び長期の化学的 耐性データ	USA Armament R&D Center	MT 購入
4	POLYPROBE	プラスチック(9000)	物理的・機械的・熱的・ 電氣的性質	International Plastics Selector, Inc.	オンライン(直接) MT 購入
5	PUREWEAR	カーボン, プラスチック, セラミックス, 金属	摩耗, 摩擦データ	Pure Carbon Co.(米)	

(このほかに, 表4の項番4, 6もプラスチックのデータを含んでいる.)

表 6 原子炉設計に関連したデータベース

項番	データベース名	対象材料	データの内容	作成機関	日本での利用
1	TOI	同位体	エネルギー準位, 崩壊連鎖, 半減期, 分極, Q 値	ローレンスリバモア 国立研究所(米)	オンライン(直接)
2	ENSDF	質量数 1~262 の同位体	核構造, スピンインパリティ, 崩壊のデータ	IAEA 及び ブルックヘブン国 立研究所(米)	オンライン(INKA)
3	SANDIA- ORIGEN	1055 の同位体	崩壊の経路, エネルギー, 断面積, 確率	Sandia 国立 研究所(米)	オンライン(直接)
4	JENDL-1	72 核種	中性子核反応データ	原 研	申込みにより検索
5	JENDL-2	170 核種	中性子核反応データ	原 研	申込みにより検索
6	AMDIS	原子, イオン	電子衝突による原子とイオンの 励起・イオン化のデータ	名大プラズマ研	オンライン(直接)
7	SPUTY	単原子固体	スパッタリング収率	同 上	オンライン(直接)
8	AMDS	45 の原子	二体衝突の断面積, 速度係数	王立ベルファスト 大(英)	オンライン(直接)
9	A+M/ACDB	原子炉材料	原子衝突による核構造等のデータ	IEEE	申込みにより検索
10	Nuclear Data Libraries, Collection of International	原子炉材料	原子核の性質	IEEE	同 上
11	EXFOR	同 上	同 上	同 上	同 上
12	FPDB	核燃料	照射の履歴・性能に 関するデータ	EPRI	MT 購入
13	FMDB	融合炉材料	原子炉設計に必要な諸データ	東大工	

コンピューターによる利用は所内に限られており, 外部からは, CINDAS が編集した印刷物を購入するか, CINDAS に問い合わせるという手段でしか利用できない。

4. 新しいプロジェクト

バイオテクノロジー, 情報処理技術等と並んで, 新材料の開発が新しい科学技術のメインテーマの1つとして

表 7 化合物総合データベースシステムを構成するデータベース

データベース名	略称	作成機関	ス コ ー プ
化合物辞書データベース	DC	日本化学情報センター (社)化学情報協会	構成各データベースに収録する化学物質を登録し、それらの名称・構造・所在等の情報を収録
バイオケミカルデータベース	BC	農林水産省食品総合研究所	農薬・肥料・食品添加物・酵素等、生化学的応用をもつ物質に関する諸データを収録
バイオリジカルデータベース	BL	国立衛生試験所	変異原性・小核誘発性・催奇形性等、化学物質が生物に及ぼす活性・毒性に関するデータを収録
化合物環境データベース	EN	国立公害研究所	環境調査対象物質について、環境測定データや分析データを中心に必要データを収録
医薬品データベース	PH	(社)日本医薬情報センター	医薬品の種々の名称(商品名・慣用名・略名等)、記号ないし番号、取扱業者等の情報を収録
安全性データベース	SF	(社)日本化学物質安全・情報センター	化学物質について規定した国内の法規制についての情報を収録
スペクトルデータベース	SP	工業技術院化学技術研究所	基礎的な標準物質の赤外、H-NMR・ ¹³ C-NMR の各スペクトルデータを収録
熱物性データベース	TH	日本科学技術情報センター	一成分系から三成分系までの熱力学的・熱化学的性質を中心とした物性データを収録
農薬データベース	PE	農薬工業会	農薬の物性、安全性、用途、使用法等に関するデータを収録
急性毒性データベース	TX	(財)日本医薬情報センター	中毒に関係する物質、生活関連物質の毒性、症状、治療法等に関するデータを収録

注目を集めるようになるにつれて、材料設計に役立つデータベースシステムについても先進的試みがなされるようになった。ここではその一部を簡単に紹介する。

4.1 全米共同利用材料特性データネットワーク¹⁰⁾

このプロジェクト (National Cooperative Materials Property Data Network ; NCMPDN) は、米国内のいろいろな機関に分散する既存の材料データベースに、利用者が1カ所の中継システムを通してオンラインでアクセスすることを目的としている。プロジェクトは金属材料特性協議会 (MPC) が主導し、産業界、学界、政府の協力によりシステムを開発しようとしており、まず特定分野で使われる包括的な材料特性データのワーキングシステムを3~5年で作り上げることを目標に検討を進めている。ここでいう材料特性データとは、金属材料、セラミックス、プラスチック、複合材料の、機械的・熱的・腐食化学的データをすべて含み、これらの統計解析、グラフ出力などの機能を備える予定である。

4.2 ASM/NBS 合金状態図データプログラム¹¹⁾

1978年に米国金属学会 (ASM) と国立標準局 (NBS) は、合金の状態図データを評価し、コンピューター化のためのシステムを開発し、データを提供するための協定に合意した。その後、NBSはデータの評価とプロトタイプシステムの開発を、ASMは提供面を受け持つて計画

を進めている。コンピューター化の目的は、単にテキスト処理と状態図のグラフィック処理ということだけでなく、批判的評価データの継続的更新、及び状態図と他のデータ (結晶構造や熱物性) の間の複雑な関係づけに対応することである。現在は二成分系を中心にデータを整備しているが、三成分以上の系も対象としており、既に行うためのシステムも開発している。将来はオンラインによる提供を行うことが目標であるが、現在の提供は出版物 (Bulletin of Alloy Phase Diagrams) によっている。

4.3 日本におけるプロジェクト

(1) 化合物総合データベースシステムの開発

科学技術庁の科学技術振興調整費による「ネットワーク共用による化合物情報等の利用高度化に関する研究」(昭和56~61年度)の中で、表7に示すような種々のデータベースシステムが開発されつつある。これらのデータベースシステムは、次のような特徴をもつ1個の総合的システムとして作り上げられることになっている。

(a) 各データベースに収録されるすべての化学物質は化合物辞書データベースに登録され、このシステムの共通キーとなる物質識別番号が与えられる。

(b) 各データベースのデータ項目は、総合的利用を可能とするため、可能な範囲での記述の標準化、あるいは各データベースにおける記述方式の比較の案内が行わ

れる。

(c) データベースを置くホストがコンピューターネットワークで結合され、利用者は1回の会話で種々のデータベースにアクセスできる。

コンピューター結合は実験的検証のレベルに留まるが、個々のデータベースは、実用的システムとして研究終了後できるだけ早期に公開される予定である。表7にみるように、これらのデータベースの多くは有機物質中心で材料データを扱っているとはいえないが、化合物辞書や熱物性のデータベースは、材料技術の基盤情報を含むと考えられ、この総合システムが今後材料分野に拡張されることはあり得るであろう。

(2) ハイブリッド化構造設計のためのデータベースに関する研究

やはり科学技術振興調整費により昭和59年度から開始された「ハイブリッド化構造設計技術による新材料創製のための基盤技術に関する研究」の一環として、データベースの問題が採り上げられた。59年度には、

- (a) 金属系積層薄膜及び超微粒子 (担当金材研)
- (b) 化合物半導体系積層薄膜化構造 (担当電総研)
- (c) セラミックス系積層薄膜化及び低次元化構造 (担当無機材研)
- (d) 有機系積層薄膜化及び超配向構造 (担当住友電工)

の各構造に対し、データ項目抽出、データ入力システムの検討等に焦点をあてた基本設計を行うとともに、共通仕様の概念設計 (担当 JICST) として、システム全体の概念、共通基盤的データベースシステム、データ記載文献への索引方式等について検討した。

(3) JICST のファクトデータベース活動

JICST は、これまで主に文献データベースの作成・提供に携わってきたが、数年前からの物性データバンク実験システムの開発を皮切りに、上記の二つのプロジェクトへの参加等により、ファクトデータベースにも積極的に関わるようになった。今後ファクトデータベース事業を本格化する計画であるが、材料データの観点からの構想は以下のとおりである。

(a) 化合物辞書データベースの整備・拡充。現在の重点である有機化合物に加えて、材料の観点から重要である無機物質、金属合金、高分子等の処理を可能とし、あらゆる物質の基盤データベースとしていくことが必要である。

(b) 熱物性、結晶構造、金属材料特性等のデータベースの作成と検索提供システムの開発。

(c) 既存の文献データベースへの物質索引、データ索引の充実。これにより文献からのファクトデータの抽出が容易になるとともに、文献データベースとファクトデータベースの総合的利用が促進される。

このようなデータベースサービスが公開されるのは、

昭和63年頃になる見通しである。

(4) 通産省のプロジェクト

工業技術院では、新材料の開発のためには、材料理論の開発とそれに基づく体系的な材料設計が必要という認識に基づき COMPASS 計画を発足させ、昭和57~59年度に検討を行った。この中では、電子材料、触媒、セラミックス、人工酵素、機能性高分子材料等につき産業材料理論開発システムの検討がなされているが、いずれの分野でも、データベース整備の重要性が強調されている。

また、次世代産業基盤技術研究開発制度における新材料の研究開発を進める中で、材料評価体制の強化及び材料データの有効活用を図るため、評価ネットワーク・データバンクについての調査研究が進められている。今のところ、既存の機関の協力の下に材料評価を実施し、得られた成果をデータバンクに蓄積することが想定されている。

5. 将来動向と課題

ファクトデータベースの整備によりもたらされるメリット、その形成に対する問題点については別稿¹⁾に述べたが、材料データベース特有の問題につき最後に触れる。

(1) 実用的データベースとするためのステップ

2.で参照したディレクトリー²⁾には100以上のファクトデータベースが記載されているが、実用的見地からはそのほとんどが開発途上ということが出来る。これは一つには、材料データの複雑さ(データの種類の多様さ、依存するパラメーターや条件の多さと依存性の非再現性などによる)ゆえに、実用的なデータ量を集積することが困難という事情により、今一つには、材料科学技術が理論的にも発展段階の分野であり、データベース利用者の先進的要請と、データあるいはデータ処理技術の間に常にギャップがあるということによる。この解決はなかなか難しいが、岩田¹²⁾や山崎¹³⁾が、彼ら自身データベースの利用者としての意識からその開発を行った経験から述べているように、体系的なデータベースの整備とともに、知識ベースやモデルに支援されるシステムというのが将来の方向ではないかと思われる。岩田は、次の五つのレベルから成る階層的なデータベース構造を提案している。

(a) 文献に記載されたままの形のソースデータファイル

(b) 統一したデータモデル(表記形式・単位等)によるマスターデータファイル

(c) 統一フォーマットによる多数の実験データを統計的に処理し、ある程度の信頼性が付与された標準データファイル

(d) 実機試験により評価を得たパフォーマンスデータファイル

(e) 利用者がそれぞれの材料設計の関心によりデータを抽出して作る設計用データファイル

(2) データベースのシステム統合

ファクトデータベースは文献データベースと異なり、一つ一つは小規模なので、類似・関連するデータベースを系統的に統合することが利用の増大及び高度化につながる。この時、以下のような問題点がある。

(a) 技術的問題：各データベースのフォーマットや記述方式を、全体で相談して標準化するか、違つたままシステム機能により吸収するかを選択がある。両者に一長一短があり、個々の状況により判断せざるを得ないと思われる。

(b) 経済的問題：材料データのデータ源は、専門の学協会の編集物であることが多いので、これをデータベースとしてサービスした時のロイヤリティの配分をどうするかは、伝統的な印刷物の売上げとも絡み難い問題となる。また、いくつかのデータベースを系統的に統合する時は、この問題のほか、統合の初期費用をどう回収するかの問題も生ずる。

(3) データの信頼性の向上

科学技術データでは、信頼性の評価ということが常に重要な因子として言及されるが、材料のデータは、物理化学的な物性データに比べて、測定や試験の方法が標準化されておらず、再現性に乏しいという傾向が強いため、データ評価も、より熟練と経験に依存した主観的なものとならざるを得ない。この種の工学的データの評価に長い実績をもつ ESDU の BARRETT は、この問題につき詳しく論じ、専門家及びそのグループの適切な人事管理こそが、評価作業の要点であると述べている¹⁴⁾。

測定データの評価ではないが、材料データの記述のもう一つの問題として、材料それ自身の命名法あるいはあいまい性のない記述法の問題がある。純物質の記述は、コンピューター処理向きの命名規則や構造表現が深く研究されているが、材料では未解決である。連続的に変化する組成値と、一定の物性値をとると認め得る組成範囲をどう調和させ、その組成範囲内の材料をどう表現するかは、材料データベースの確立のための重要なテーマであろう。

文 献

1) 山内脩司, 小野寺夏生: 情報管理, 27 (1984), p. 674

- 2) Directory of Online Databases, 6 (1984), p. 414 [Cuadra Associates, Inc.]
- 3) EUSIDIC Database Guide 1983 (1983), p. 324 [Learned Information Ltd.]
- 4) M. E. WILLIAMS, L. LANNOM and C. G. ROBINS, Eds.: Computer-Readable Databases — A Directory and Data Sourcebook (1982), p. 1472 [Knowledge Industry Publications, Inc.]
- 5) V. E. HAMPEL, W. A. BOLLINGER, C. A. GAYNOR and J. J. OLDANI: An Online Directory of Databases for Material Properties, UCRL-90276 Rev. 1 (1984), p. 125 [Lawrence Livermore National Laboratory]
- 6) J. OSUGI and Thermochemical Property Database Working Group of JICST: Proc. 9th CODATA Conf. (in press)
- 7) 小野寺夏生, 愛宕隆治: ケミカル・エンジニアリング, 29 (1984), p. 26
- 8) J. L. SEARS: Inf. Processing Management, 18 (1982), p. 61
J. L. SEARS, M. S. L. JACQUES, A. M. THOMPSON and J. M. D. THOMAS: 5th Int. Online Inf. Meeting (1981), p. 361 [Learned Information]
- 9) H. H. LI and C. Y. Ho: ASME MPC, 20 (1983), p. 107
- 10) J. A. GRAHAM: ASME MPC, 20 (1983), p. 1
- 11) K. J. BHANSALI, D. F. REDMILES, J. L. MURRAY and J. SIMS: Natl. SAMPE Symp. Exhib., 29 (1984), p. 1450
- 12) 石野 稔, 岩田修一: 日本原子力学会誌, 23 (1981), p. 489
S. IWATA, A. NOGAMI, S. ISHINO and Y. MISHIMA: Data for Science and Technology (Proc. 8th Int. CODATA Conf.) (1983), p. 119 [North-Holland]
- 13) H. IHARA, M. YAMAZAKI, Y. KAWAGUCHI, K. WATANABE and S. GONDA: Data for Science and Technology (Proc. 7th Int. CODATA Conf.) (1981), p. 457 [Pergamon Press]
M. YAMAZAKI, S. YOSHIDA, H. IHARA and S. GONDA: Data for Science and Technology (Proc. 8th Int. CODATA Conf.) (1983), p. 111 [North-Holland]
- 14) A. J. BARRETT: Development and Use of Numerical and Factual Data Bases (AGARD Lecture Series No. 130; AD-A136559) (1983), p. 5.1 [U. S. Dept. of Commerce, National Technical Information Service]