

「モノ」と「情報」の狭間で

科学技術庁 無機材質研究所

轟 眞 市

Between “Object” and “Information”

Shin-ichi Todoroki

National Institute for Research in Inorganic Materials

概 要

IT化の流れは、材料の研究開発手法を質的に変化させていくと考える。キーワードは「モノ」と「情報」との相互作用の高度化である。コンビナトリアル科学技術の導入は、単なる作業の加速だけでなく研究開発者の思考をも変質させていこう。またオブジェクト指向によるソフトウェア開発が、装置開発の自由度を増加させていこう。

Abstract

The trend for developing information technology changes the methodology of research and development of materials. The keyword is an activated interaction of “Object” and “Information”. Combinatorial science and technology brings about not only accelerating tasks but also changes our way of thinking. Object-oriented programming makes possible to develop “tailor-made” apparatus for R & D more easily.

1. はじめに

ここ5年の間に、インターネット技術の大衆化は格段に進展した。当時本誌に上梓した拙稿[1]を読み返すと、その経過は歴然である。昨今の情報技術(IT)産業の隆盛はすさまじい。我々が身を置いている部品材料分野の研究開発も、IT製品に関連する分野への重点化がいやおうなく進められている。

このようなIT化の波は、研究開発の対象を変えてだけでなく、研究開発のプロセス自体も変えようとしている。本稿では、この変化の波にどう乗っていくかの私なりの決意(大風

呂敷とも言う)を示すことで、編集部から与えられた題目である「21世紀のガラス研究者の夢」を語ることにしたい。

2. 人間をとりまく3つの流れ

先日のおとした思い付きから話をはじめ。世の中を回っているのは、突き詰めれば「モノ」、「カネ」、「情報」の3つに分類できるのではないかと。インターネットや移動体通信の大衆化により、「情報」を身近に低コストに流通させるインフラが整った。電子マネー等の技術導入により、このインフラに見かけ上「カネ」の流通が可能になった。すると「カネ」の対価となる「モノ」の流通、すなわち物流の重要性が増すこととなった。「モノ」に分類される“材

料”を扱っている我々はここから何を教訓にすべきか？

3. 研究開発のIT化

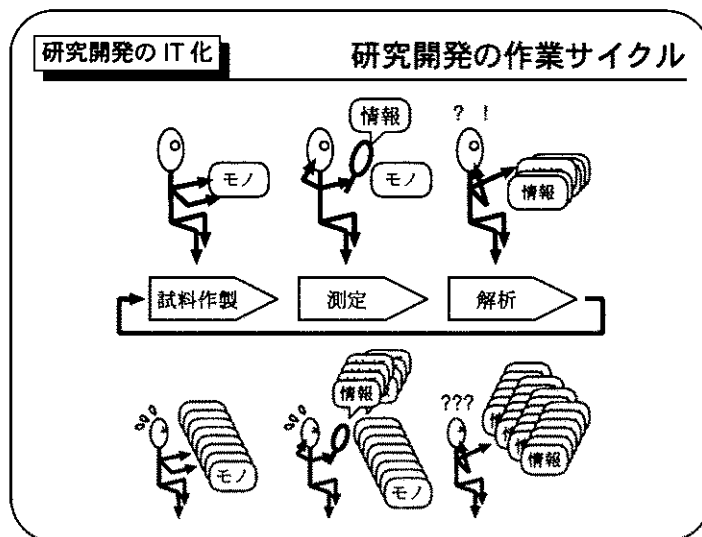
「モノ」の研究開発という生業は、「モノ」を組み合わせた時に発現する新しい価値を追求することと言える。これは、さまざまな「モノ」の状態を「情報」として収集することから始まる。集めた多数の「情報」を前に、頭を使って価値ある状態を特定することで研究開発の1サイクルが終了する（図1上）。IT化の波は、この研究開発サイクル自体を質的に変えていくだろう。

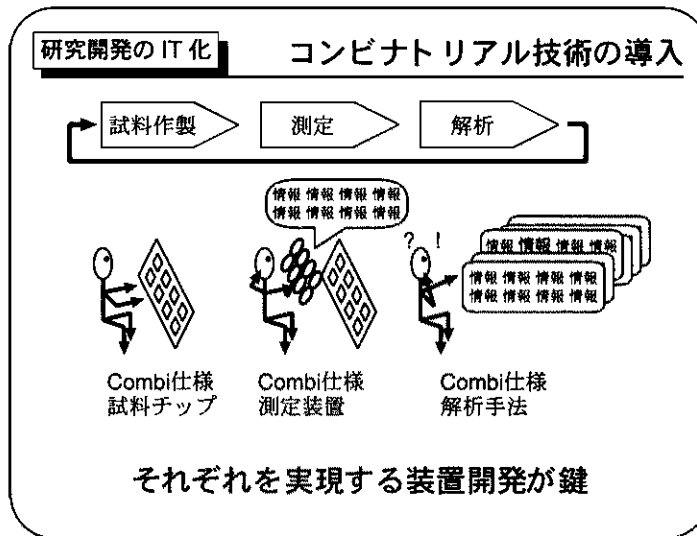
ひとつの分かりやすい例は、コンビナトリアル技術の導入である。この技術は既に製薬の分野で確立されたものだが、やっていることは、「複数の試料を、互いに作製条件が異なる様にして一括作製し、その後一括して測定・解析して、目的にかなう条件を選び出す」ことである。これは、従来の技術のまま取り扱う量を増やす「人海戦術」でも実現可能である（図1下）。「コンビナトリアル技術」（以下、コンビと略す）とわざわざ銘打つのは、図2に示すように、試料作製、測定、解析にそれぞれ「コ

ンビ仕様」の技術を導入して、1プロセス内に流れる試料の数を人手をかけずに増やすことにある。具体的な事例を紹介するだけの紙面はここに無いので、[2～5]等の文献を参照して頂くとして、一般的な話を進める。

いっぺんに沢山の試料を処理する技術は昔からある。（温度勾配炉にガラス試料を並べて熱的安定性を判断する手法等）それらとの違いは2点挙げられる。一つは、コンピュータ制御による自動化である。今までは大量生産技術として工場で用いられてきたものが、実験室レベルで手軽に利用できるようになってきた。駆動系、測定系、制御系の装置を買ってきて、それら全てをパソコン制御することが容易になってきた。2つめは、試料作製、測定、解析の全ての段階をコンビ仕様にするることである。どれか一つでもコンビ仕様にならないと、その段階が律速となり、目的達成が高速化されないのである。これは、コンビ仕様装置開発にまとまった初期投資が必要であることをも意味する。

こうして導入したコンビ技術は、従来の技術を完全に代替するものではない。コンビ仕様を導入するために、目をつぶらなければならない仕様も当然出て来る。コンビ技術はあくまで、無数の条件の中からよさそうなものを選び出す





「スクリーニング」に効果を発揮するものであり、その後には従来の技術による精密な評価が必要となる。

コンビ技術の本質が「スクリーニング」にある、ということは、コンビ技術は研究開発における思考の質的变化をもたらす。今まで我々は「スクリーニング」を思考実験に基づいて行っていた。既存の理論や知識を総動員して、実験する価値のある条件を選び出してから手を動かしていた。これは、既存の理論や知識の枠に外れたものは、自動的に除外される事を意味する。コンビ技術は、極端に言えば考える前に手を動かすことを可能にする。

白川博士のノーベル化学賞受賞は、実験条件の誤りがきっかけになったことを考えると、既存の理論や知識の呪縛は大きい。コンビ技術がその呪縛を解く、とまでは言わないが、その呪縛を解く選択肢のひとつにはなるだろう。

4. 情報工学との融合？

コンビ技術を例に話を進めて来たが、IT化の流れはもっと大きい枠組で進行する予感がある。一言で言えば、「研究開発の手法に情報工学の成果が積極的に導入されていく」こと

だと思う。前節で装置開発が鍵と述べたが、自分が必要としている装置を如何に早く手中におさめるか、という点でソフトウェアが果たす役割が大きくなるであろう。このような考えに至るきっかけとなったのは、国産のプログラミング言語 Ruby との出会いであった¹。

研究開発に用いる装置を揃えるのには、まずは汎用の市販品を買い、必要に応じて改造を施すのが一般的であるが、これだけで競争力を確保するのは難しい。次の段階は、考案したアイデアに基づき、装置開発を外注するもしくは自作するということになる。この場合によくあるのは、ハードウェアの能力は申し分無いのに、それを駆動させるソフトウェアがお粗末で、能力が100%引き出せないことである。大量生産等を目的とした単機能の装置なら、ソフトウェアも単機能で良かった。研究開発に用いる装置に対しては、我々はさまざまなアイデアが実現できるよう、いろいろな条件で運転させたい要求がある。装置の発注前にその全ての仕様を確定しておくことは難しい。自作で対応するのであれば柔軟性は増すが、専用ソフトウェアを書きメンテするのは大きな負担となる。

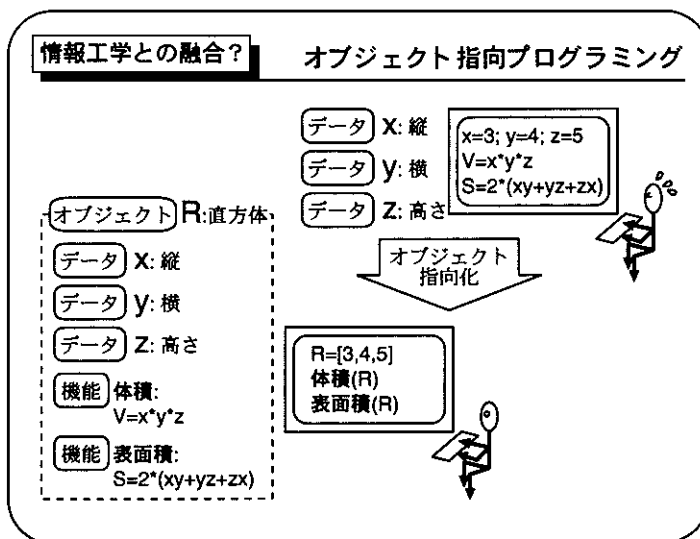
¹<http://www.ruby-lang.org/>

実際にソフトウェアを書いたことのある人ならわかって頂けると思うが、新しい機能を盛り込んでソフトウェアが大きくなっていくにつれ、全体の構成が把握しきれなくなってくるのだ。ソフトウェアを改良するアイデアを思い付いて、プログラムに手を入れようとすると、まずプログラムに何が書いてあったかを思い出す作業に時間を取られるのである。これは、目的とするアルゴリズムをプログラム言語に表現するのに、少なくとも数行から十数行必要で、なおかつプログラムのいろいろな部分に目を通す必要があるからである。

筆者も専用プログラムを書く必要に迫られ、たまたま Web 上で目にした Ruby というプログラミング言語を試してみたところ、手放せなくなってしまった。1995 年末に公開されたこの言語は、作者のまつもとゆきひろ氏の言葉によれば、「いかに楽に、いかに気持ちよく、いかに効率良く」目的を果たすかという点をこだわった言語である。綿密に計算された言語仕様により、驚く程単純で、かつ読みやすいプログラムが書けるのである。単純で読みやすいということは、上で述べた「思い出す作業」がほとんど要らなくなり、ソフトウェアの開発効率が向上することを意味する。

なぜそうなるかという説明は解説書[6, 7]を読んで頂くとして、ここでは Ruby がその基礎に置いている「オブジェクト指向」が、我々の扱っている「モノ」的な感覚をプログラミングという「情報」の世界に導入しようとしている点を指摘したい。(以下の説明は、初心者に対して「オブジェクト指向」の一面を強調するための説明であり、その本質からいささか外れているかもしれないことを、あらかじめお断りしておく。)

今まで我々が使っていた BASIC や C 等の言語は、「データ」を操作して目的を達成するものであった。Ruby や Java 等のオブジェクト指向の言語は、「データ」と「機能」から構成される「オブジェクト」を操作して目的を達成する。例えば、直方体の体積の計算をする場合、我々はその寸法を x, y, z 等の「データ」に格納し、その「データ」で体積の公式を記述して目的の値を得ていた(図3右上)。オブジェクト指向の言語では、まず直方体という「オブジェクト」を用意する。その中には、直方体の寸法の「データ」と、直方体の体積を算出する「機能」を埋め込んでおく。次に、直方体オブジェクトのサイズを定義し、その直方体オブジェクトに対し体積を問い合わせること



で、目的の値を得る（図3下）。この例で重要なことは、 x, y, z などの媒介変数（「データ」）と体積の計算手順（「機能」）をオブジェクトの内部に隠蔽することができる点である。その結果、目に触れるプログラムには、「モノ」をどう扱うかという論理を重点的に記述すれば良く、「 x は縦の長さ、 y は横の長さ」というような一時的な約束事を覚えておかなくて済むのである。

ここからは無責任な夢物語だが、例えば酸素イオンオブジェクトとケイ素イオンオブジェクトをうまく用意できれば、セルオブジェクト内にそれらを多数ばらまいて緩和させる様な、シリカガラスの分子動力学計算プログラムが、誰にでも簡単に記述できるようになるのではなかろうか？

ここまで述べてきたことは研究開発手法のIT化のほんの一例であろう。さまざまな手法によって「モノ」と「情報」との相互作用が高度化されていき、研究開発の質的变化が進行していくのだと思う。

5. おわりに

最初に「決意」と書いてしまったが、要は新しい道具を積極的に使っていきたいというだけの話である。しかし道具は道具にすぎない。道

具にこだわるあまり、本来の目的を見失わない様自戒したい。入稿メ切りが20世紀末であったこの記事が、世の中の流れの早さ故に出版時には既に陳腐化してしまわないことを祈って筆を置く。

参考文献

- 1) 轟眞市：ニューガラスとインターネット, New Glass, Vol. 11, No. 3, pp. 58-61 (1996), (<http://www.ngf.or.jp> から閲覧可能)。
- 2) 井上悟：ガラス研究手法のコンビナトリアル化—ガラス形成領域探索法について—, 化学工業, Vol. 51, No. 2, pp. 128-133 (2000)。
- 3) 井上悟, 轟眞市, 松本壮央, 本戸孝治, 荒木哲夫, 渡辺裕一：ガラス研究手法のコンビナトリアル化の現状と将来展望, 第41回ガラスおよびフォトンクス材料討論会講演要旨集, pp. 12-13, 三重県津市 (2000), (A-07)。
- 4) 轟眞市, 井上悟, 松本壮央：温度勾配型ガラス試料ライブラリ作製装置による簡易 TTT 図作成, 第41回ガラスおよびフォトンクス材料討論会講演要旨集, pp. 8-9, 三重県津市 (2000), (A-05)。
- 5) 井上 悟：新ガラス創成への期待, 機能材料, Vol. 21, No. 1, pp. 23-29 (2001)。
- 6) まつもとゆきひろ, 石塚圭樹：オブジェクト指向スクリプト言語 Ruby, アスキー出版局, 東京 (1999), (ISBN4-7561-3254-5)。
- 7) 原信一郎：Ruby プログラミング入門, オーム社, 東京 (2000), (ISBN4-274-06385-2)。