

計算機マテリアルデザインコピーマートの構築
Creation of Computational Materials Design Copymart

代表研究者 国際高等研究所、大阪大学

中西 寛 International Institute for Advanced Studies,
Osaka University Hiroshi Nakanishi

共同研究者 京都高度技術研究所 山田 篤 Advanced Software Technology & Mechatronics

Research Institute of Kyoto Atsushi Yamada

大阪大学 小倉 昌子 Osaka University Masako Ogura

大阪大学 佐藤 和則 Osaka University Kazunori Sato

立命館大学 松井 章浩 Ritsumeikan University Akihiro Matsui

We have created and constructed a “Computational Materials Design Copymart” based on a “copymart” which is coined by Professor Zentaro Kitagawa in 1988. The copymart is a contract-based model of a copyrighted-works-transactions market where right holders can in advance decide the terms and conditions of licensing their own copyrights with the aid of the information technology. Our computational materials design copymart specializes in dealing the academic information in the computational materials design science. This academic information includes the program codes, for example, the first principles calculation codes, which have been developed by the researches in computational materials design science and are of particular value for other researchers to investigate the industrial-use materials and to design the new material functions. The computational materials design copymart is a mutually beneficial system for academic information. Through this study work, we have contributed to the sound foundation and further development of the computational materials design science.

研究目的

計算機マテリアルデザイン学における学術情報、特にその研究の過程で生み出される計算コードを、権利者の配布ポリシーに基づきながら、同時に幅広く利用されることを志向して、流通させ得る学術情報システムを構築することが本研究の目的である。このシステムは、国際高等研究所副所長北川善太郎氏によって 1988 年に提唱されたデジタルコンテンツの流通に関する契約モデル「コピーマート」を基にしたもので、権利者が利用条件を提示したうえで、権利者と利用者が契約に基づいて権利処理するマーケットプレイスであり、かつ計算機マテリアルデザイン学の学術情報に特有の“研究途上の計算コード”を含むこと等を考慮したことに特徴がある。本研究は計算機マテリアルデザイン学のような新知見が急速に蓄積しつつあり、情報流通が自身の研究発展に大きく関係する分野において新しい学術情報システムのモデルを創出するもので、広く他の研究にも応用が期待されるものである。

研究経過

計算機マテリアルデザインは、固体その他の物質系について、その構成原子の種類や結晶構造等の原子配置を様々に設定して電子状態を計算し、その結果から磁性、電気伝導性、誘電性、弾性、光応答性、化学反応性等の性質およびその複合的性質を理論的に予測する研究の総称である。近年、密度汎関数理論に基づく計算手法の進歩と利用できる計算機の演算能力向上によって、ある範囲の物質については、全く理論的に物質系の性質を定量的に予言することが可能になり、実験にさきがけて有用な物質系（異質の物質を接合した複合系を含む）の存在を予言し、後に実験によって確認される例が相次いでいる。この計算機マテリアルデザイン学は、現実物質を扱い、定量的にその物性を予言でき、かつその物性発現機構を電子スケールから克明に解析することを可能にしている。この機能を活用して現在は、望む物性をもつ物質系を設計する段階へ進もうとしている。これがこの「計算機マテリアルデザイン」という名称の由来である。

この分野の研究者は、新しい計算手法を、たとえば電子相関効果をより精密に取り扱う計算手法や、原子をより多く含む大規模な物質系を計算するための計算手法等を開発し、またそれを検証するために、開発した手法を現実の物質系に適用することを行っている。その際、計算を実際に行うために計算コードが作成される。従来の学問においては、計算手法や、それを適用した計算結果、またその結果を解析して得た物性発現機構の理論等がこの分野の学術情報であり、それらは学会や学術論文誌等にて発表、公開される。しかし、研究者個人が開発した計算コードの公開・流通手段は確立されておらず、従来は研究者間の個人的な関係によって相互利用が細々と行われてきたにすぎない。計算コードの公開・流通手段の確保は、知的資産である計算コードそのものが生かされるとともに、計算コードの改良にオリジナル開発者以外の研究者も参加でき、この学問領域のさらなる発展に寄与すると考えられる。そのためにも計算コードの公開・流通手段の整備が必要である。

さて、計算コードはデジタルコンテンツである。デジタルデータの形態をとるものに関する今日の著作権に関わる問題は、次の 2 点に根ざしていると考えられる。

- (1) 誰でもが質の劣化なく安価に複製が可能。
- (2) 誰でもがインターネットにより安価かつ大規模な配布が可能。

従来の著作物、たとえば書籍の形態をとるものであれば、出版社のみが(1)製造と(2)流通の手段を確保できたが、現在は、誰でもがそれを行い得る環境にある。手段を持ちうる環境自体は、手段を行使する対象が自らの著作物である限り問題はない。しかし、他者の著作物はその権利者の許諾なくして複製・利用されれば、権利者の私権が脅かされることとなる。すなわち、著作権を処理するシステムの不在が問題なのである。先の書籍の例では、(1)製造と(2)流通の手段を確保する出版社が、著作権を修理しており、権利者は出版社と契約を結べば事足りたのであった。この現在のデジタルコンテンツの大規模な複製・流通の問題に対し北川善太郎氏は発想を転換し、情報工学を積極的に利用してコンピュータネットワーク上に著作権処理を内在するシステムをつくれば権利者の権利侵害問題は、権利者の権利実現に見事に変質すると考え、1988年にデジタルコンテンツの流通に関する契約モデル「コピーマート」を提唱した。このコピーマートは、権利者があらかじめ自らの著作物の利用条件を決めた権利データをコピーマートに登録し、かつ、その著作物のコピーが対価と引き換えに提供される場をコンピュータネットワーク上で提供している。このようにすることで、権利者と多数の利用者との間の個別の利用許諾契約が自動でスムーズになされ、また利用者は、望む著作物のコピーが簡便に入手でき、しかもコピーの適正な対価が著作権者に支払われることになる。すなわち「コピーは悪いこと」であるという従来の権利保全に対する消極的考え方に対して、著作権処理を内在するコピーマートシステムを用いることにより、あらかじめ権利者の許諾があるので「コピーができる」ようにしている。

本研究では、このコピーマートを基に計算機マテリアルデザイン学の学術情報流通に特化した計算機マテリアルデザインコピーマートを構築している。しかし、これまでコピーマートで扱われてきたコンテンツとは、異なる特性を計算機マテリアルデザイン学の学術情報は含んでいるため、そのままでは適用はできない。そこで、本研究では計算機マテリアルデザイン学の研究者と法学の研究者および、これまでコピーマートの実践に関わってきた実績のある情報工学の研究者でチームを組み、計算機マテリアルデザイン学における学術情報の特性、学術情報の権利者の意識、利用者の意識、想定される利用形態などこれまでとの相違点を調査し、それに関わる法律上および契約上の問題点、システム構成の問題点を洗い出し対処した。机上の空論とにならないために、大阪大学大学院理学研究科の赤井久純氏の協力を得て、氏が開発しているKKR法による第一原理計算コード

「Machikaneyama2000 (Akai-KKR)」をターゲットの学術情報として実際に作動する計算機マテリアルデザインコピーマート・サーバーを構築した。試験運用は、第12回計算機マテリアルデザインワークショップ(京都、2008年3月)の会場で行った。ワークショップ参加者に利用者となって当サーバーにアクセスしてもらい、当システムの意義、利便性、操作性、これからの期待および問題点等に関するアンケートを実施した。その回答は構築への貴重な参考情報として活用している。

試作した計算機マテリアルデザインコピーマートの構成を図1に示す。コピーマートに関連する当事者は、コピーマートを運営する「主宰者」、学術情報の著作権を持ち自らのその著作物を出品する「登録権利者」、出品された学術情報を利用する「利用者」の3者からなる。当然ながら、「登

録権利者」と「利用者」は、多数存在することを想定している。図では、それぞれのうちから1対象を代表して表示していると考えてもらいたい。関係する契約は① CMD コピーマーケット登録契約、② CMD コピーマーケット利用契約、③ 計算コード利用許諾契約の三つである。契約書の内容は紙面の都合上省略する。①は学術情報の権利者が自らのその著作物を出品するために計算コードに関する情報（計算コードの名称、用いている計算手法、実行要求環境など）とそれに関わる権利情報（権利者名、提供条件等）を、計算機マテリアルデザインコピーマーケットに登録し、主宰者はその依頼に基づき利用者に利用させるべくそのデータベース（著作権マーケット）を構築し公衆送信可能状態にするための、「登録権利者」と「主宰者」の間の契約である。②は、利用者が計算機マテリアルデザインコピーマーケットを利用（アクセス、閲覧、計算コード利用受諾契約手続等を）するための、「利用者」と「主宰者」の間の契約である。③は、実際に学術情報をコピーし利用に供するための「登録権利者」と「利用者」の間の利用受諾契約である。①と②は、計算機マテリアルデザインコピーマーケットにおいて、それぞれ一定内容の契約書を作成して用いている。契約相手となる「登録権利者」および「利用者」毎の変更はない。③は、権利者の希望する利用受諾内容により変更されうる。またこれは「登録権利者」と「利用者」との契約であって、通常の利用受諾契約ならば、登録権利者の方で用意されるものである。しかし、該権利者としては計算機マテリアルデザイン学の研究者が主に想定され、その権利者の利便性を考えあらかじめ定型の契約書を用意しオプションで変更できるようにした。なお、①と③の契約手続き、(1) 契約書の提示・閲覧、(2) 契約者（利用者）情報の記入（③のみ）(3) 契約書の再確認、(4) 承諾は、コンピュータ・システム上で実施できるようになっている。

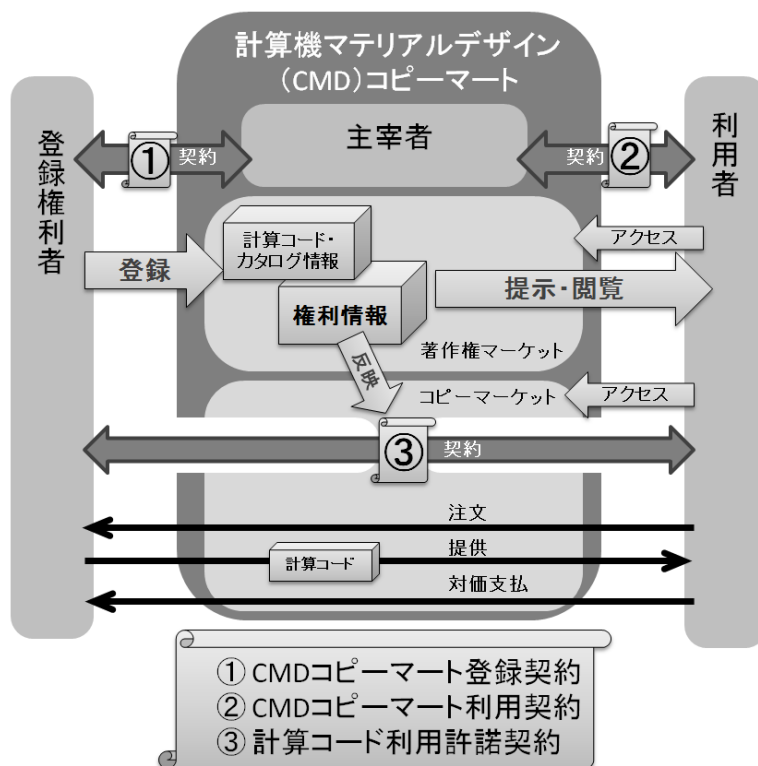


Fig.1 System diagram of Computational Materials Design (CMD) Copymart

利用者の手続きは以下のものになる。(1) 計算機マテリアルデザインコピーマーケット主宰者が提供するウェブサイトに利用者がアクセスする。(2) 当該システムの概要と目的を閲覧した後、②CMD コピーマーケット利用契約を結ぶ。(3) 契約により著作権マーケットに登録された計算コードのカタログを閲覧することができるようになる。カタログには、その計算コードの仕様(利用者が望むコードを選択するのに必要十分な計算機マテリアルデザイン学におけるデータが簡潔に整理されている。)と権利者の受諾する利用条件が記されている。これにより利用者のコード選択を援助する。(4) 利用するコードが決定された後、③計算コード利用許諾契約を、権利者との間で結ぶ。その際利用者は、自らの情報を利用者情報として入力し、システムが処理する仕組みとなっている。試作システムでは、権利者への通知、利用者への利用情報の提示、記録の保存を実施するまでを行う。たとえば、現在扱っている「Machikaneyama2000 (Akai-KKR)」では、利用情報として、計算コードをダウンロードするためのFTPサーバーのURLとアクセスのためのパスワードを提供している。

本研究は、全く異なる研究分野の研究者で構成した体制で実施した。始めた当初、概念の議論をする前に言葉の定義から始めなければお互いの意思疎通すら困難であったが、困難を克服し2年間の研究期間において、モデルシステムを構築し、それをサーバーハードウェアに実装した試作システムの完成まで達することができた。先に述べた試験運用により、これまで見えてこなかった新たな問題点も明らかになり、継続して研究を続行し、日々発展する学術情報を提供し実際に活用・運用できる契約モデル「計算機マテリアルデザインコピーマーケット」を充実させたい。

考察

今回計算機マテリアルデザインコピーマーケットの構築において考慮しなければならなかった当該学問領域の学術情報の特徴は多数あったが、その主たるものを以下に記す。

まず、第一はこのコピーマーケットの対象とする著作物が、計算機マテリアルデザイン学の研究に際して研究者個人(グループの場合もある)が開発した計算コードであることによる。計算コードは研究の成果の一つではあることは間違いないが、それが公表されること自体に開発した研究者にインセンティブがあるかどうかは自明ではない。発表すべき研究成果としては、先にも述べたとおり考案した計算手法や、それを適用した計算結果、またその結果を解析して得た物性発現機構の理論等があり、計算コードはいわば副産物である。それに引き替え公開することによる著作権上の問題など、デメリットは大きい。他者の利用を契約により許諾するとすれば、どこまでの利用が許諾されるかも契約により明らかにされなくてはならない。利用範囲として、計算コードそのものの研究・教育における使用、該計算コードを使用したマテリアルの研究・教育、民間企業での研究開発、商業利用目的の研究開発等が想定される。計算コードの改変についてはどうだろう。計算機マテリアルデザイン学の発展においては、改変・再配布は望むべきものである。他者による改良は歓迎されるし、新しい手法が考案された場合、最初からコード開発せずに既存コードに実装できれば開発も加速する。しかし、他者の参入は著作権関係を複雑化していく。また常に改良であるかは自明ではない、改悪もありうる。不良コードの一人歩きが蔓延しかねない。それらをクリアするために、

各研究者が利用受諾契約書を作成するのはあまりにも敷居が高く、ともすれば公開しないという安易な選択の方が選ばれやすい。

また、計算コードは、研究の過程で作成されるものであるから、日々改良され完全な完成というもの無く「永遠のβバージョン」品の典型である。この側面は、いくら現状のままの提供であると断っても、一般の流通経路に乗せる商品には適さない。かといって不具合修正を開発者に強制する契約では、ますます計算コードを開発した研究者は、公開から遠ざかるであろう。このように研究成果の核であり知的資産の集約であるにも関わらず、公開に消極的にならざるを得ない計算コードを扱わなければならないところが、他の学問領域の研究成果を扱う学術情報システムと異なる。

計算機マテリアルデザイン学のさらなる発展には、これらの難題を解決して、さらに権利者、利用者双方にインセンティブを与え、計算コードの公開を促進するシステムが欠かせない。この分野独特の独立した学術情報システムが一つの解であり、また、権利者と利用者の双方の納得する品質保証は、この分野で実績のある研究者が、学術論文・学会等で発表している成果を生みだしている計算コードであることを保証することであると考えた。これらを総合的に加味してシステムに付属する契約内容を吟味し、また双方に利用を促す様々な利便性を付与する仕組みを考え計算機マテリアルデザインコピーマートに実装している。本研究で打ち出した方策は、同様に新知見が急速に蓄積しつつあり、情報流通が自身の研究発展に大きく関係する分野における学術情報システムの創出に有用であり、広く他の学問領域にも応用が期待される。

研究発表

口頭発表

1. Hiroshi Nakanishi; “Atom scale dynamics in fuel cell and computational materials design (CMD)”, Asian Physics Symposium 2007 (Bandung , INDONESIA, 30th Nov. 2007)
2. 中西寛、小倉昌子、佐藤和則; 「計算機マテリアルデザインコピーマート」、第12回計算機マテリアルデザインワークショップ (京都、2008年3月6日)