

2007年度特別研究プロジェクト「計算機マテリアルデザインコピーマートの構築」
 Research Project: Creation of Computational Material Design Copymart

実施期間： 2006～2007年度（第2年次）

Term of the Project: 2006-2007 fiscal years (2nd year)

研究代表者： 中西 寛 国際高等研究所招へい研究者／大阪大学大学院工学研究科助教

Project Leader: Dr. Hiroshi NAKANISHI, IAS Researcher;

Assistant Professor, Graduate School of Engineering,
 Osaka University

研究目的：

本研究の目的は、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、計算コードを流通させ得る学術情報システムを構築することである。このシステムは、国際高等研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ることに特徴がある。本研究は計算機マテリアルデザイン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。

なお、本研究は、(財)山田科学振興財団の研究助成を受けて実施している。

参加研究者リスト： 11名（◎研究代表者）

氏名	職名等
◎中西 寛	国際高等研究所招へい研究者／大阪大学大学院工学研究科助教
小倉 昌子	大阪大学大学院理学研究科助教
佐藤 和則	大阪大学産業科学研究所助教
高田 恭子	国際高等研究所研究員
松井 章浩	立命館大学法学部非常勤講師
山田 篤	財団法人京都高度技術研究所情報メディアグループリーダー
赤井 久純	大阪大学大学院理学研究科教授
森川 良忠	大阪大学産業科学研究所准教授
笠井 秀明	大阪大学大学院工学研究科教授
金森 順次郎	国際高等研究所長
北川 善太郎	国際高等研究所副所長

研究会：

- 第1回：2007年 6月 6日（於 高等研）
- 第2回：2007年 7月 6日（於 高等研）
- 第3回：2007年 7月 19日（於 大阪大学）
- 第4回：2007年 9月 14日（於 高等研）
- 第5回：2007年 10月 27日（於 高等研）
- 第6回：2008年 3月 7日（於 高等研）

分科会：2008年 3月14日（於 大阪大学）

第7回：2008年 3月21日（於 高等研）

研究実績の概要：

計算機マテリアルデザイン学における学術情報システム「計算機マテリアルデザインコピーマート」を、国際高等研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」を基に構築している。氏のコピーマートでは、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ることに特徴がある。一方、計算機マテリアルデザイン学の研究者は、新しい計算手法を開発し、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、計算を実際に実施するために計算コードが作成される。かつては研究成果としての学術情報は、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であり、それらは学会や学術論文誌等にて発表、公開されてきた。それに対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。「計算機マテリアルデザインコピーマート」は、この学問領域特有の属性をもつ“研究途上の計算コード”を扱うことに特化したコピーマートとして構築している。本研究期間においてプロトタイプの試験運用を第12回計算機マテリアルデザインワークショップにて実施し、実運用へ向けての知見を収集するまでに至った。

Whole Achievement:

We have created and constructed a “Computational Materials Design Copymart” based on a “copymart” which is coined by Dr. 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. In the 12th computational materials design workshop, which was held in March 2008, the prototype demonstration of the computational material design copymart system was available, and we obtained the useful knowledge and information for implementation of this system. Through this study work, we have contributed to the sound foundation and further development of the computational materials design science.

担当： 金森所長