

掲示板

## SASJ ソフトウェア勉強会の報告

吉川 英樹\*

物質・材料研究機構 極限計測ユニット 表面化学分析グループ  
〒679-5148 兵庫県佐用郡佐用町光都 1-1-1 SPring-8 BL15

\*YOSHIKAWA.Hideki@nims.go.jp

(2012年2月15日受理)

2011年2月3日に第36回表面分析研究会(大阪大学中之島センタ)において行ったソフトウェア勉強会についての報告を行う。ソフトウェア勉強会は、表面分析に関するデータ解析ソフトウェアの習熟、高度化、多様化を目指したもので、発足した経緯ならびに勉強会当日の議題について報告を行う。

## Report on the SASJ study group of data processing softwares

Hideki Yoshikawa\*

Surface Chemical Analysis Group, Nano Characterization Unit,  
National Institute for Materials Science,  
BL15 SPring-8, 1-1-1 Kouto, Sayo, Hyogo 679-5148, Japan

\*YOSHIKAWA.Hideki@nims.go.jp

(Received: February 15, 2012)

The SASJ study group of data processing softwares, which was held in Osaka on February 3rd in 2011, was organized to realize deep understanding, upgrading and multifunctionality of the data processing softwares in the field of surface analysis. The discussion of the day is reported based on the background of the study group.

### 1. はじめに

2011年2月3日に大阪大学中之島センターで行った第36回表面分析研究会において、ソフトウェア勉強会を開催し23名の方々にご参加頂いたので、その報告を行う。

ソフトウェア勉強会は、COMPROを起点として表面分析技術におけるデータ解析ソフトウェアの習熟、精度評価、高度化、多様化を目指した勉強会である。一口にデータ解析ソフトウェアと言っても、その手法や適用対象は多種多様でターゲットが絞り切れないが、勉強会に参加する各メンバーの興味あるところがそのままターゲットになると考えている。COMPROが電子分光スペクトル解析のソフトウェアであり、著者も電子分光の分野の人間であ

るため、当初は電子分光の議論が多くなると予想されるが、イオン分光や画像解析など電子分光以外の分野に興味のある方が勉強会に参加して下されば、それらの分野のソフトウェアについても当然議論されるべきである。手法や適用対象は異なっているが、その底流にある数学的および統計学的な数値解析の考え方には共通のものがあるので、分析手法の違いを越えたソフトウェアの議論は非常に有意義と考えている。

ソフトウェア勉強会を発足するに至った背景には、スペクトルの測定結果の議論を多くの共同分析者とするときに定性的な話か半定量的な話に留まることが多く、きちんとした定量的な議論にまで発展することが少なく、コストをかけて測定した実験

結果の情報をフルに活かしてきれていないと感じてきた著者の実体験がある。その解析の不十分さは、データ解析ソフトウェアの機能の不足と精度保証の乏しさが大きな要因の一つとなっている。表面分析の分野においてデータ解析技術を少しでも進歩させるため、ソフトウェアの勉強と開発を行うことを志向している。

## 2. ソフトウェアのライフタイムと分散型のソフトウェア開発

ソフトウェア勉強会では、既存のデータ解析ソフトウェアの勉強に加えて、既存のソフトウェアでカバーできない部分についてソフトウェアを新たに開発することも勉強会の大きな役割と考えている。ソフトウェア開発の課題は、「そのソフトウェアのライフタイムを如何に永くするか」にある。前述したようにソフトウェアへのニーズは多種多様であるため、多くのニーズを満たすソフトウェアを短期間で完成することは不可能である。またニーズは時と共に変わるため、ソフトウェアの更新が常に必要になる。非常に多数のユーザーがいるソフトウェアであれば、ビジネスとしてそのソフトウェアの開発や更新を行う十分な人数を揃えた体制を永く維持することは可能であるが、表面分析の世界におけるデータ解析ソフトウェアはユーザーの数が限られているため、ボランティアかそれに近い形態の開発となり、ソフトウェアのライフタイムを永く保つのは容易ではない。

そのような状況の元で、ソフトウェア開発を進めるには、「一つの大きなシステム」としての集約型ソフトウェアではなく、「多数の小規模ソフトウェアの集合体」としての分散型ソフトウェアの開発を行うことにならざるを得ない。ここで言う分散型ソフトウェアとは、以下のようなものを考えている。

- ① 「ハブとなるソフトウェア (以下ハブソフト)」と「ハブとなるソフトウェアから駆動されるサテライトのソフトウェア (以下サテライトソフト)」と「データベース」の3つから構成される。サテライトソフトは、ハブソフトとは異なるコンピューター言語で書かれていても良い。
- ② ハブソフトとサテライトソフトの間をつなぐインターフェース部の仕様は、標準化し公開する。インターフェース部は、XML 等のマーク

アップ言語で記述し、例えハブソフトやサテライトソフトの内部構造が変わっても、インターフェース部は仕様の変更をする必要がないようにする。極論を言えば、インターフェース部の仕様を満たせば、全く異なるソフトウェアでも、ハブソフトやサテライトソフトと連携することができるようにする。

- ③ ハブソフトもサテライトソフトも演算部分はニーズに合わせて変化するという前提で、インターフェース部とデータベース部の仕様だけは標準化して不変とする。

上記の考え方は、ソフトウェアのライフタイムを永くし、かつより多くの方に参加して頂けるための仕掛けと考えている。ハブソフトとしては、SASJ において実績のある COMPRO を考えており、今回のソフトウェア勉強会発足のアイデアの初期段階から吉原一紘氏にご協力を頂いた。

## 3. 勉強会当日の議論

勉強会当日は吉原氏に COMPRO (現在のバージョンは ver.10) の解説ならびに最新機能について紹介をして頂いた。COMPRO は、Microsoft Visual C# で書かれており、軽快な GUI を持つスペクトル解析プログラムである。オージェ電子分光スペクトル (後藤敬典先生の絶対オージェ電子分光(XPS)スペクトルを含む) および X 線光電子分光(XPS)スペクトルのデータベースを持つと共に、バックグラウンド処理やスムージング処理、デコンボリューション処理、定量評価などの XPS スペクトルの解析に必要な基本機能を持っている。また、角度分解 XPS のデータ解析や、主成分分析などの多変量解析の機能も有する。COMPRO は、.NET Framework の上で動いているため、C#以外の言語で書かれたソフトウェアと連携することが可能であることが紹介された。前述したように、勉強会では多くの方が無理なくソフトウェア開発に参加して頂くようにしたい。ソースコードが 100 行未満の非常に規模の小さなソフトウェアやアルゴリズムでも、他の多くの人にとって役に立つことがしばしばあり、これらの小規模のソフトウェアも取り入れて行きたいと考えている。そのためにも .NET Framework は有効なプラットフォームの一つと言える。なお、当日は時間の制約があり COMPRO の機能については概説するに留まったが、今後は吉原一紘氏に COMPRO の機能をより詳しく

解説して頂く機会を持ちたいと考えている。

小規模ソフトウェアを COMPRO から駆動できるようにし、多くの方に利用できるようにする案については、勉強会に参加された方々から支持を頂けた。ただし、具体的なサテライトソフトの駆動の仕方については、今後議論すべき課題である。ただ、実例が無いと議論が進まないとの指摘もあり、今後実例を作って行きたいと考えている。例えば、吉川から TPP-2M の式に基づいて試料の結晶構造から IMFP を計算する自作プログラムが紹介された。これも実例の一つになり得ると考えている。

アルバック・ファイ社の渡部大介氏からは、データ処理ソフトウェア間で連携する際のデータの扱い方に関する共通データフォーマットについての解説があった。表面分析における共通データフォーマットについては、既に ISO14976 などによる記載があるが、シンプルな構造であり、データフォーマットの共通化と言う概念としては有効であっても、実際のソフトウェア上で利用するには限界があ

る。表面分析以外の一般の分野では、相互通信や可読性に優れた XML などのマークアップ言語で共通データフォーマットを記述するケースが増えているとの指摘が渡部氏よりあった。マークアップ言語を使うことにより、ソフトウェア間の連携部について、より柔軟でライフタイムの長いものが製作できる。これについても実例を元に今後検討を進めて行きたいと考えている。

#### 謝辞

ソフトウェア勉強会の開催にあたって、多大なご指導を頂きましたオミクロンナノテクノロジー・ジャパンの吉原一紘様に深く感謝いたします。また XML などによるマークアップ言語を用いた共通データフォーマットについて、色々アドバイスを頂きましたアルバック・ファイの渡部大介様に深くお礼申し上げます。

\*\*\*\*\*

#### 添付資料

(ソフトウェア勉強会当日にお知らせをした勉強会発足の趣意書)

#### §1 勉強会発足の背景と動機

表面分析の装置は、安定性・スループット・自動測定面でハードウェアの能力を大きく向上させてきました。しかしながら、依然現場では「どのような条件で測定をすれば良いか」、「データをどのように解析すれば良いか」で悩み続けています。ベテランの方であれば豊富な経験に裏付けられた技術と理論でこのような悩みは低減できますが、一つの分析手法を深く極めてベテランになるために OJT に年月をかけることは近年難しくなりつつあります。

以上のような状況の元で、短期間でベテランの技術と理論を身に付けるには、データ解析ソフトウェアの積極的な利用が不可欠です。しかしながら、データ解析ソフトウェアの利用の現実には、以下のような問題を抱えており不満足なものです。

- ・データ解析ソフトウェアのマニュアルを読んだ

だけでは、現場で実際にそれをどのように使いこなせば良いかが分からない。

- ・データ解析ソフトウェアがブラックボックスになっており、得られた解析結果をどこまで信じて良いかの判断がつかない。

- ・既存のデータ解析ソフトウェアだけでは、自分がやりたいことが十分に出来ない。

そこで、表面分析研究会において、データ解析ソフトウェアに関心がある有志の方々に集まって頂き、以上の問題点を一つ一つ解決していきたいと考え、ソフトウェアの勉強会を発足させることを提案致します。

ご存じのように、SASJ には COMPRO というデータ解析ソフトウェアの伝統があります。そのようなデータ解析ソフトウェアに対する深い理解ならびに熱意が現場で求められる時代が来たとの認識をしています。その理解の元、この勉強会がその礎の一つになると期待しています。

## §2 勉強会の概要

以下の3点を目的としてデータ解析ソフトウェアの勉強会を行いたいと思います。

- ①データ解析ソフトウェアに関して勉強し、情報を共有する。
- ②データ解析の今後の方向を議論し、必要であればデータ解析ソフトウェアのパーツ群を自ら作成し、互いに共有する。
- ③以上の成果を最終的には公開する。

上記を実現するための付帯的な情報を以下にお知らせします。

- (1) 勉強会で対象とするソフトウェア
    - ・表面分析のデータ解析に関係するソフトウェアであれば、どんなものでもOKです。
    - ・市販のソフトウェアでも、自作のソフトウェアでもOKです。
- 自作ソフトウェアは、独立したソフトウェアの場合もありますし、既存のソフトウェアに組込む

アドインのような付属的なソフトの場合もあります。

- (2) 勉強会での作業の流れ  
参加者の自由な討論をスタートにして、関心のある部分から勉強を進めます。アウトプットとしては、勉強結果をまとめたレポート、あるいは開発したソフトウェアとなります。アウトプットは、原則としてSASJ内に公開します。

- (3) SASJの研究会との関係：  
当面はSASJ研究会の公式の活動（講演、ワーキンググループ、委員会）とは独立した有志の集まりと考えています。ただし、勉強会の主旨は、SASJの幹事会ならびに研究会で説明します。

- (4) 会場：  
SASJの定期研究会に合わせて勉強会を行います。例えば、SASJ研究会初日の夜に小会議室を別に借りて勉強会を行うことを考えています。