《連載全3回》

R & D 部門における 『一タ共有システム構築の事前準備の要所(中)

上島 豊 (株) キャトルアイ・サイエンス 代表取締役



《PROFILE》

略歴:

1992年 3月

大阪大学工学部 原子力工学科 卒業 大阪大学大学院工学研究科 電磁エネルギー工学専攻 博士課程修了 1997年 3月

1997年 4月

日本原子力研究所 博士研究員 日本原子力研究所 研究職員 日本原子力研究所 研究職員 日本原子力研究開発機構(旧日本原子力研究所) 退職 2000年 4月 2006年 3月

2006年 4月 キャトルアイ・サイエンス設立 代表取締役 就任

主な参加国家プロジェクト:

文部科学省 e-Japan プロジェクト「ITBL プロジェクト」,「バイオグリッドプロジェクト」 総務省 JGN プロジェクト「JGN を使った遠隔分散環境構築」

文部科学省リーディングプロジェクト「生体細胞機能シミュレーション」

主な受賞歴: 1999年 6月 日本原子力研究所 有功賞 「高並列計算機を用いたギガ粒子シミュレーションコードの開発」 第7回サイエンス展示・実験ショーアイデアコンテスト文部科学大臣賞 「光速の世界へご招待」 2003年 4月

2004年12月 第1回理研ベンチマークコンテスト 無差別部門 優勝

培風館「PSE book ―シミュレーション科学における問題解決のための環境(基礎編)」ISBN: 456301558X 培風館「PSE book ―シミュレーション科学における問題解決のための環境(応用編)」ISBN: 4563015598 培風館『ペタフロップス コンピューティング』ISBN978-4-563-01571-8

臨川書店『視覚とマンガ表現』ISBN978-4-653-04012-5

属人的データ共有状況を脱するため の事前準備(手順書作成編)

話が脱線しすぎたので、話を戻す。データ共有のため に必要な準備(実験や分析を第三者が再現するのに十分 な情報及び利用、活用観点を考慮した項目のリストアッ プと合意形成)が終わった後、データベース化、システ

ム化のために直接的に必要な準備を行う。「システムは オルゴールのようなものだ」という話を思い出してもら うと、何をしないといけないかは自ずとわかってくる。 そう!楽譜が必要なのである。つまり、「データ探査と データ処理を誰が読んでも実施できるレベルの手順書」 を作ることが最初の課題である。

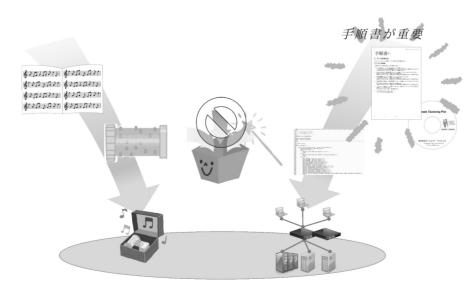


図7 システムを作るには、データ探査とデータ処理の手順書が必要

「データ探査とデータ処理を誰が読んでも実施できるレベルの手順書」を作ることは、簡単なようで、なかなか難しい。データ探査とデータ処理自体は、データベースやシステムがない時からすでに行っているはずである。ただ、それを手順書としてまとめている人は、研究者の中では非常に稀な存在で、ほとんどの研究者は経験という記憶に頼って行っているはずである。経験を的確な文書に起こすことが難しいことは、自転車の補助輪をどのようにして外せるようになったか?、どのようにして平泳ぎができるようになったか?、どのようにして、日本語を話せるようになったか?を考えてみればわかるはずである。

ただし、データ探査とデータ処理に関しては、これができない限り、システム化はできない。実際、補助輪外しや水泳や日本語収得に比べると格段に簡単な課題なので、覚悟を決めて取り組み、慣れてしまえば、この程度の経験を手順に落とすのは簡単である。研究の中核的な思い付き(この材料を配合してみれば良さそうだ、ここの攪拌は泡立てないように注意しながら)は、どのようにして思いつくかを手順に落とすことは、非常に難しい(とはいえ、本当はグループリーダからすればそれをしたいのだと思うが・・・)はずで、それを要求されているわけではないので、データ探査とデータ処理の手順化ぐらいは頑張ってほしい。

手順書を書いていくといくつかの課題にぶち当たるは ずである。一つ目は、手順が確定していないことが発覚 するということである。「実験や分析を第三者が再現す るのに十分な情報及び利用、活用観点を考慮した項目の リストアップと合意形成」は終わっているが、実際にま だデータ共有・利活用を行っていなかったりしていると 実験を記録したファイルの保存場所がまだ、決められて いない(属人的)などの問題が浮上していない場合があ る。当然、このような課題が出てくるたびに合意形成を し、改善していくことが必要である。想像だけで大丈夫 と思っても、案外抜けがたくさんあるもので、合意形成 が終わった後で、実際にそれに沿って、データ共有・利 活用を実践しておくことが重要ということである。「こ れをシステムで改善したいんだ」という話をよく聞くが、 システムでも実験データファイルを適当な場所に置かれ るとそれを見つけて保存することはできないし、そもそ もシステム化するとある一定のルールに従って、データ を登録してもらうことになる。つまり、システムがない 段階で、一定のルールに従って、実験データファイルを 置けないのであれば、システム化したってデータは登録 されないだけである。「これをシステムで改善したいん だ」と思った場合、「システムは魔法の箱ではない」と いうことを思い出して、手順書作成を進めてほしい。

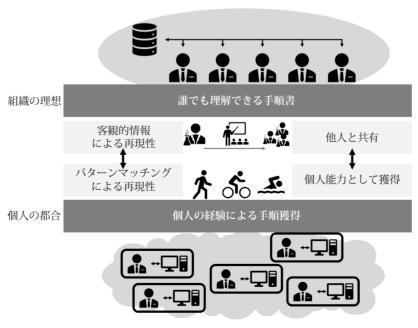


図8 経験による手順獲得と文章による手順書作成

R & D 部門におけるデータ共有システム構築の事前準備の要所

二つ目は、「多種多様なすべてのデータ探査と処理の 手順書なんて、書けるわけがない」というものである。 これは、ある意味では正しいが、ある意味では間違って いると言える。R&Dでは、経理や財務のように完全に 決まりきったデータ探査と処理はほとんどなく、それを 逐一挙げていくのは、現実的ではない。また、今日、新 しいデータ探査と処理が発生するかもしれない。しかし、 システム化をするときには、それでは困るのである。ど うデータ探査をして、どうデータ処理をするのか?詳細 な情報なしでそれができるような魔法の箱はないのであ る。「だって、エクセルやグラフソフトや実験計測装置 についているソフトは、詳細な情報なしでデータ処理が できるように作られているじゃないか?」,「google も 我々の詳細な情報なしで世界中の情報を探査できるじゃ ないか?」と言った感じで、そんなことはないはずだ という人もいるかもしれない。しかし、それはどんなこ とでもできるようコストをかけて、様々な機能を組み込 んであるか、深く洞察して見ると、実は単純なことしか できなかったことが見えてくる。エクセルが長い期間を かけて現行の機能を実現するために費やした開発費は数 百億円はくだらないだろうし、google の検索では、項 目名を指定した検索(圧力が○○以上など)は、そも そも目指していないのである。また、なんでもできるソ フトウェアを使って、自分たちが利用しようとしている ことを実現しようとすると結構難しいもので、 高機能な エクセルなどは、よく知っている人やネットで、使い方

を調べないといけないことがよくあるはずである。実は もっと汎用的なソフトウェアが存在するそれは、プログ ラミング言語である。エクセルもワードもパワーポイン トもプログラミング言語で作られている。巷を賑やかせ ている機械学習の多くも python というプログラミング 言語を使っている。プログラミング言語も歴としたソフ トウェアで、ある意味汎用ソフトウェアの極みである。 何を言いたいかというと、様々なことができて、汎用的 になればなるほど,使いこなすためのハードルがあがり, 実際使う力があったとしても多くの手数がかかるとい うことである。そういう意味でも魔法の箱は存在しない (あったとしたら使いこなすためのハードルが高く、使 うときの呪文がやたら長くなるので、便利ではない)の である。世の中で便利だなというものは、ある一定の場 面に特化していて、その場面で発生するあらゆることを できるだけ簡単に実現できるように設計されているので ある。つまり、「すべてのデータ探査と処理」の場面で 発生するあらゆることがわからないとそれをオルゴール のドラムに刻み込めないのである。しかし、「その場面 で発生するあらゆること」を本当に手順化しているかと いうとそれは少し違う。スマートフォンの音楽アプリで 音楽を聴く時に,「アプリを起動して,○○という音楽 を選択して・・・」というときに、○○の楽曲名ごとに 手順書を書いていたら大変であるし、実際、アプリの開 発者はそんなことはしていない。楽曲部分は、変数化し て手順を書くのである。

具体的な手順書

- 1.「熱伝導率」が「10以上」のデータを探します。
- 2. 使用「添加剤名」ごとにデータを分けます。
- 3. X軸に「添加剤濃度」,
- Y軸に「熱伝導率」を選択します。
- 4. グラフタイプ「散布図」を選択し、 グラフ作成ボタンをクリックします。

正しい汎化をした手順書(変数化)

- 1. 「変数 y」が「範囲 r」のデータを探します。
- 2. 使用「項目名 s1,…,sn」ごとにデータを分けます。
- 3. X軸に「変数 x」,
- Y軸に「変数y」を選択します。 4. グラフタイプ「グラフ名a」を選択し、 グラフ作成ボタンをクリックします。

具体的手順を変数化

誤った汎化をした手順書(曖昧な表現)

- "ータを探します。 とグラフにしたいもの毎に分けます ・

図9 実用的な汎用的手順書の作り方

ただし、一度も具体的に楽曲を探さないで手順書を書 くと失敗する。楽曲名がわからないことも多いし、同じ ような楽曲名や全く同じ楽曲名があるとき、「○○とい う音楽を選択して」の前に、「最近の」とか「△△が歌っ ている」という絞り込みを入れないといけないはずであ る。この辺りはいろんなパターンがあると思うので、そ のパターンが出尽くすように色々具体例で手順書を書 き, その手順通り実施をしてみて, その後, 具体的な部 分を○○、△△という変数に置き換える(汎化する)の である。また、汎化の時に正確性を犠牲にして、曖昧に なってしまうことがよくあるが、実際には数学の変数式 のように一般化されているが厳密性は一切劣化していな いものでないといけない。簡単に「具体的な部分を変数 に置き換える」と書いているが、この変数名が具体的な ものをすべて的確に言い表す単語でないと、結局自分が 行いたいことの手順を知ろうとして手順書を見ても変数 名がいい加減だと、自分が今しようとしていることの何 をどこに置き換えればいいのかわからない状態になる。 変数名は重要なので、頭を悩ませるところであるが、しっ かりと考え抜く必要がある。実際には、「様々あるすべ てのデータ探査と処理の手順書」も本当にすべてを列挙 するのではなく、できるだけ多くのパターンに関して具 体的な値で手順書を作成し、手順書通りで意図通りのこ とができるかを確認してから、具体的な部分を変数に置 き換えて汎化した手順書を作る必要がある。そうすると 手順書はそんなに多くの数にはならないし、稀な作業に

関しては、今回のシステムでの利用対象外として、手順書を書くのをやめてもよい。どちらにしても「様々あるすべてのデータ探査と処理」のパターンと頻度は、把握しておく必要はある。そして、これはソフトウェア会社にはできなく、実際の研究者しかできないことである。

手順書づくりの中で、取り組んだほうが良いことが もう一つある。データ探査やデータ処理の手順が明確 になったら、「なぜ、そのデータ探査をするのか?」、 「なぜ、そのデータ処理をするのか?」を複数の研究者 で意見交換をし、合意を形成してみることである。た ぶん、漠然とした答えはすぐ出るだろうが、新人や素 人にその理由がはっきりとわかるというレベルで、明確 な答えが出ることは少ないはずである。もちろん、専門 的な背景の有無により、わかるわからないということは あろうと思うが、それ以上に曖昧になってしまっている はずである。手順の話と同じで、人間の頭の中で分かっ ていても他人にはそれを伝えられないし、わかっている と思っている人同士でも同じかどうかも確かめられない のである。そして、「なぜ」が明確になっていないとい うことは、目的もはっきりしていないということで、そ のような目的が曖昧なままの状態で作業をすると、結論 もおかしくなるのは皆様よくお分かりの通りである。ま た、「なぜ、そのような方法でデータ探査をするのか?」、 「なぜ、そのような方法でデータ処理をするのか?」か も同じように複数の研究者で意見交換をし、合意を形成 することは、非常に重要ということである。

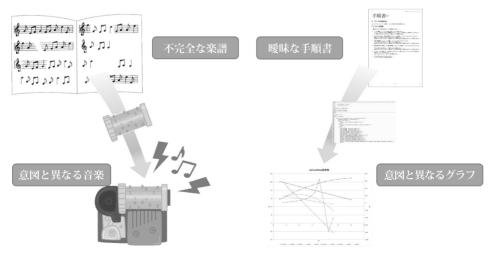


図 10 手動で行えていないことをシステムに組み込んではいけない

R & D 部門におけるデータ共有システム構築の事前準備の要所

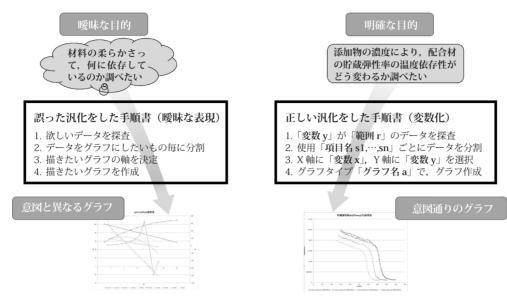


図 11 データ探査や処理の目的を明確化することの重要性

これらの「なぜ」の真の目的を明確化するためには、障害の原因分析に良く使われている「なぜなぜ分析」という方法が便利である。5回程度「なぜ」を繰り返すことで、深堀ができ、真因に近づけるはずで、「なぜなぜ分析」自身の方法は、Webでもいろいろな解説や注意点が書かれているので、漠然とではなく、必ずそちらを参照して実施してほしい。真の目的が明確になれば、真の目的からデータ探査やデータ処理方法を見つめ直し、最適でないことが分かれば手順書を改善することが必要である。

手順書ができれば、実際にその手順書が汎用的に利用可能かを検証する意味を含め、その手順が発生すると手順書の各工程にかかる時間を典型的な数パターンで測定し、記録する。時間を記録するために手順書通りに実施するのではなく、それこそ新人などにお願いして、日常業務を遂行するために手順書を使い、ついでに時間を記録してもらうのである。それなりの日数をかけることで、手順書の問題も明らかになってくるはずである。頻度に関しては、ある程度は実測できるだろうが、限られた時間ではどうしても偏ってしまうので、全員で意見を出し合い、合意形成をするしかない。ここで、手順の問題を明確化しておかないとシステム化してからでは、原因がどこになるのかを特定する作業や手戻りが大きすぎる。急がば回れである。