

## 計測データの信頼性に関する課題提起

○鈴木 峰晴

SAコンサルティング

## Issues in Reliability of Measurement Data

○Mineharu Suzuki

SA Consulting

## 1. はじめに

短期間での材料開発が進められている近年、多面的な信頼性が問題視されている<sup>1)</sup>。表面分析の分野でも、計測装置、試料準備、計測、データ処理のフロー全てに渡る信頼性が問題となる。計測における信頼性の要素は、3R (repeatability, replicability, reproducibility) として整理されている<sup>2)</sup>。この概念は、実験系のみならず、計算科学にも拡張されている<sup>3)</sup>。

今回の学術講演会表面分析研究部会では、それを踏まえて、最新の装置を用いた計測、データ処理の進展を紹介していただき、さらには表面化学分析における標準化に関して議論する機会を企画した。

## 2. 3Rについて

文献2, 3) では、計測に関する3Rを次のように定義している。

- **Repeatability** (繰返し精度) : 同一グループによる同一場所・計測系・計測条件での複数回計測から得られる精度。計算実験では、研究者が確実に計算を繰り返すことができることに相当する。
- **Replicability** (復元精度\*) : 異なるグループによる同じ計測系・計測条件 (同一場所または異なる場所) での複数回計測から得られる精度。計算実験では、独立したグループが作成者の artifact を用いて同一の結果を得ることに相当する。 (\*筆者の訳)
- **Reproducibility** (再現精度) : 異なるグループによる異なる場所・計測系・計測条件から得られる精度。計算実験では、独立したグループが完全に独立して開発した artifact を使用して同じ結果を得ることに相当する。

同様に JIS 規格<sup>4)</sup>でも repeatability (繰返し精度) は「同一と見なせるような測定試料について、同じ方法を

用い、同じ試験室で、同じオペレータが、同じ装置を用いて、短時間のうちに独立な測定結果を得る測定の条件による測定結果の精度」、また、reproducibility (再現精度) は「同一と見なせるような測定試料について、同じ方法を用い、異なる試験室で、異なるオペレータが、異なる装置を用いて、独立な測定結果を得る測定の条件による測定結果の精度」と定義されている。replicability に相当する JIS 規格は見当たらなかった。

## 3. 背景にあるもの

Bare 等<sup>5)</sup>は3Rが問題となる背景として、(a)近年の科学が学際的で多手法に渡ること、(b)システムや取り上げる課題・ツールの複雑さが増していること、(c)限られた資源での競争の激化を挙げている。筆者は、それに加えて、(d)研究・教育機関での分析化学の軽視や(e)分析研究者の長期的な育成不足や資産の継承不足があるのではないかと考えている。それらが、初歩的なミス、信頼性の問題を招いていると考えられる。

## 4. まとめに代えて

情報を公開するにあたっては繰返し精度の確認・公表は必須であり、復元精度・再現精度を高めるためには全てに渡り可能な限り多くの情報の開示が必要となる。再現精度向上のためには、異なる装置での計測条件の設定が大きな課題であり、高再現精度の実現は他2つのRを包含することになる。

## 文 献

- 1) M. Baker, Nature 533, 452 (2016).
- 2) S. L. McArthur, Biointerphases 14, 020201 (2019).
- 3) H. E. Plesser, Front. Neuroinf. 11, 1 (2018).
- 4) JIS Z8402-1「測定方法及び測定結果の精確さ(真度及び精度) - 第1部: 一般的な原理及び定義」
- 5) D. Baer and I. Gilmore J. Vac. Sci. Technol. A 36, 068502 (2018).

\*E-mail: suzuki.mineharu@SAconsul.com