



平成 28 年度 TIA 連携プログラム探索推進事業「かけはし」 調査研究報告書

【研究題目】計算科学とデータ科学の連携による実験データ高度解析手法の開発

【整理番号】TK16-051

【代表機関】東京大学 物性研究所

【調査研究代表者（氏名、連絡先 TEL & Mail）】
常行真司、03-5841-4127、stsune@phys.s.u-tokyo.ac.jp

【TIA 内連携機関：連携機関代表者】
NIMS 国際ナノアーキテクトニクス研究拠点：宮崎 剛
産総研機能材料コンピューショナルデザイン研究センター：三宅 隆
筑波大学システム情報系：櫻井鉄也

【TIA 外連携機関】

- ・ポスト「京」重点課題(7)「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」
(参画機関：東北大、東京理大、横浜国大、分子研、名工大、阪大)
- ・元素戦略プロジェクト<拠点形成型>
(中核機関：NIMS(磁石)、京大(構造材料、電池・触媒材料)、東工大(電子材料))
- ・経産省/NEDO「超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト」
産総研を中心として、東大、NIMS、筑波大の参加を得て H28 年度に開始。
- ・その他の経産省/NEDO プロジェクト
「未利用熱エネルギーの革新的活用技術研究」等、産総研・東大等で計算シミュレーションを活用した熱マネジメント材料の探索研究を協力実施中。

【報告書作成者】 常行真司 【報告書作成年月日】2017 年 3 月 31 日

【連携推進（具体的な連携推進活動内容とその活動の効果等）】

<ポスター交流会の実施>

イベント名： ” TIA かけはし ” ポスター交流会
～ 計算科学・計測技術・インフォティクスの融合によるインテリジェント解析～
開催日時： 平成 28 年 8 月 30 日（火）13:30～17:30
会場： エポカルつくば 405 号室（ポスター）、406 号室（ショートプレゼン、懇談会）
効果：TIA 参画機関に所属する方を中心とした、計算科学、データ科学、数理科学の理論研究者や、それらの理論研究に対してニーズを持つ実験・計測研究者間の情報交換の場、新しい共同研究や新規プロジェクト提案の芽を育む場の提供を目的として実施した。前半はポスター発表者全員によるショートプレゼンテーションを行い、後半はポスターセッションを実施した。合計 91 名の参加があり（NIMS：35 名、東大：26 名、筑波大：14 名、AIST：7 名、KEK：6 名、その他：3 名）、65 件の発表があった。発表のカテゴリとしては下記左の通りである。

・広い意味でデータ科学的手法を使った研究	19 件
・電子状態計算の手法開発、アプリ公開	10 件
・特定の物質・材料のシミュレーション	16 件
・化学反応や動力学のシミュレーション	6 件
・ツール、数値計算手法、アプリ普及	6 件
・実験手法、実験	8 件





会議実施後に、参加者に対してアンケートを取った結果、上記右側の回答が得られ、若手の研究者から好評であり、継続した実施の希望が多かった。

<プログラム講習会実施>

イベント名： 第1回 TIA 第一原理計算講座

開催日時： 1日目 平成 29 年 1 月 25 日（水曜日）午前 / 講義 午後 / 実習

2日目 平成 29 年 2 月 1 日（水曜日）午前 / 講義 午後 / 実習

会場： 東京大学物性研究所 6 階セミナー室

参加者： 10 名

効果：ポスター交流会時に KEK から要望があり、本講座を企画実施した。KEK が代表機関である TIA 光・量子計測 MG 所属メンバーを中心に募集を行い、KEK4 名、NIMS2 名、AICS1 名、筑波大 1 名、その他 2 名の合計 10 名の参加があった。近年、光・量子計測を利用した実験研究では、第一原理計算との連携が重要になってきている。講習では OpenMX の特徴となる内殻電子の束縛エネルギーの計算を実施した。講座終了後、アンケートを実施したところ、継続的な講習会の実施、滞在型での計算科学修得機会の設置等の要望が届いた。また、計算結果の解釈等で継続的なアドバイスがあるとありがたいとの声もあった。

<その他の活動>

下記イベントを“かけはし”の共催、協賛で実施。本事業の意義や活動状況を幅広い分野、領域に周知し、参加者や“かけはし”関係者と情報交換を行った。（ ）は主催

H28.11.7; “人を支援する AIx ビッグデータで実現する「Society5.0」”（筑波大）

H28.12.5-6; “ポスト「京」次世代産業を支える新機能デバイス・高性能材料シンポ”（東大）

H29.2.23; “計算物質科学を拓く第一原理計算とその機能モジュール”（RIST・東大・分子研）

H29.3.6; Prof. Dario Alfe (University College London) の講演会の開催(NIMS)

【調査研究内容】

平成 28 年度は、上記イベントの開催を通して“かけはし”提案課題「計算科学とデータ科学の連携」に関する調査研究を実施した。得られた情報から抽出した課題を下記にまとめて示す。

- 1) 各機関とも大型研究開発 Pj を実施しており、新たな研究 Pj の企画提案より現在実施している Pj での研究成果を産業界や実験家などに普及させ、社会実装するところに課題を持っている。
- 2) 計算科学を実験に適用するニーズは多々あり、特に計測技術の向上や発展に伴い、その計測で得られたデータを解析するための新しい計算機能の要望が継続的に生じていることがわかった。
- 3) 国プロで開発した第一原理計算ソフトの汎用化を図るには、実験家のニーズを取り込んだ新計算機能開発の充実と、そのソフトの初級者向け講習会の実施、継続的な利用者サポート体制、長期的な整備体制の保証などが必要であることがわかった。
- 4) ソフト利用講習会を実施する際には、PC へのインストール等でトラブルが生じる可能性があるため、あらかじめ整備された PC を準備した方が良いことがわかり、PC を 8 台購入した。
- 5) 計算科学初心者は計算ニーズに対してどのアプリを利用すればよいかかわからないので、物質科学アプリケーションソフトのポータルサイト“MateriApps”の検索機能は有効。各機関の Pj で外国人ポストクが増えているため、サービス向上のためサイトの英語化を実施した。
- 6) 新材料探査には、演繹的な計算と帰納的なデータ科学の両方が必須であり、NIMS のマテリアルインフォマティックスの講習会を東大や AIST で実施している計算科学の講習会とリンクさせて実施すれば、興味を示す企業研究者や実験家は多いことが想定される。

【今後の課題】

- 1) 平成 29 年度は、KEK を加えた 5 機関で“かけはし”に継続課題として提案し計測連携を強化。
- 2) 各機関や各 Pj の研究成果の普及を軸とした合同の分野振興活動を企画、実施する。
- 3) 計算・データ融合の新物質材料探索手法と実習のカリキュラムを構築し公開を検討
- 4) TIA「共通基盤プラットフォーム」として「計算・データ融合物質科学(仮)」の立ち上げ検討。
- 5) 平成 30 年度より、本分野振興事業を継続する取り組み体制構築と活動リソース獲得を目指す。
- 6) 博士人材の社会実装、社会人教育を実施する人材育成・交流事業の構築検討。

以上。