

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

Experimental data analysis coordinated with computational science

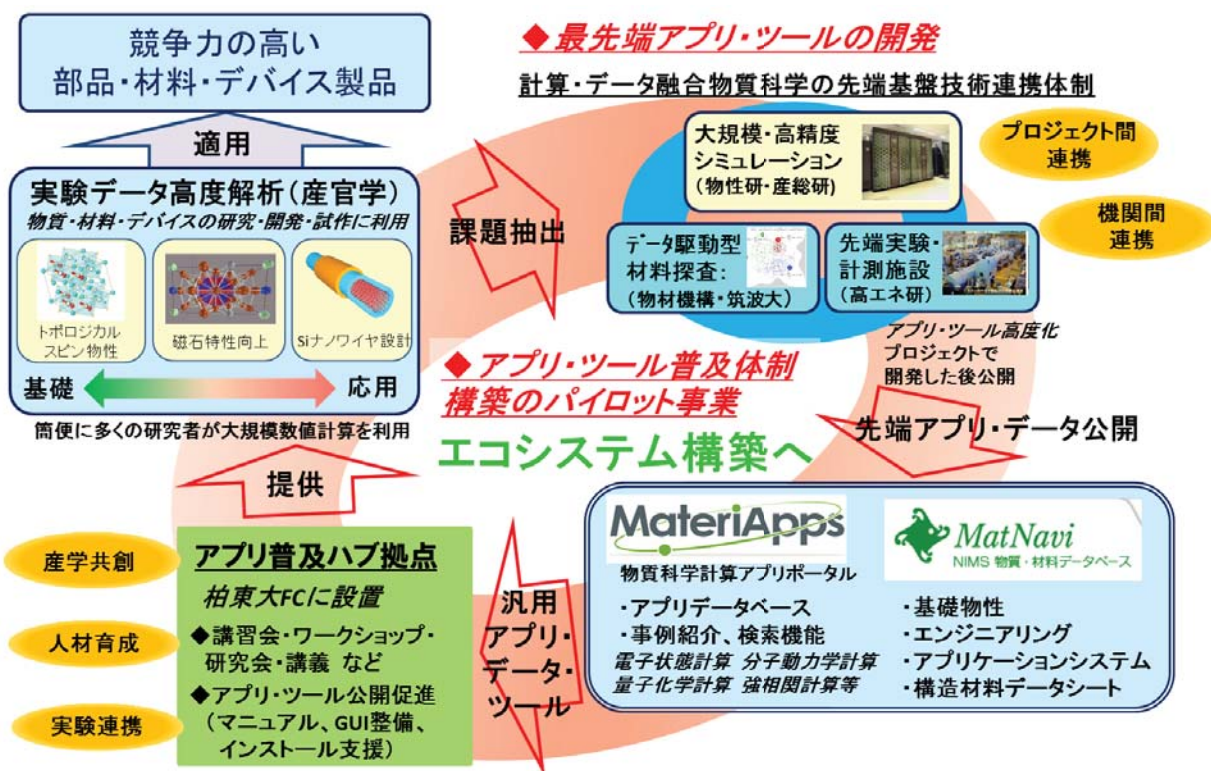
概要

先端実験装置から出力される物質・材料データを、シミュレーション手法とデータ科学的手法の連携により解析するスキームの調査研究を行った。その結果、我々の手法を産業界や実験家などに紹介し、さらなる普及を図ることとなった。ここからフィードバックを得て、材料科学の新たな課題解決のために手法開発を継続する仕組みの構築を目指す。

We investigated a scheme to analyze the material data output from advanced experimental apparatuses by the cooperation between simulation methods and data scientific methods. As a result, we decided to further introduce and disseminate our methods to industries and experimentalists. We will hereby get feedback and aim to construct a mechanism to continue development of simulation and analysis methods to solve new problems in materials science.

最先端物質科学シミュレーション手法とデータ駆動型材料探査手法のエコシステム

Scheme for ECOSYSTEM of computational and data driven materials science



H29年度に実施予定の連携講座

List of hands-on and workshops in FY2017

◆物質科学計算アプリケーションソフトウェア

- ・第一原理計算ソフト“OpenMX”(初級・中級)講習会 (結晶・界面・溶液など広範な物理系を対象で局在基底を利用)
- ・有効模型ソルバーパッケージ“Hq”講習会 (広汎な多体量子系の基底状態及び低励起状態の波動関数を並列計算によって求める)
- ・有効模型ソルバーパッケージ“mVMC”講習会 (広汎な多体量子系の基底状態の波動関数を変分モンテカルロ法で求める)
- ・第一原理計算ソフト“CONQUEST”ワークショップ (オーダーN法を数十万原子以上を含む超大規模系の超並列計算に対応)
- ・物質科学計算オープンソフトウェアパッケージ“MateriApps”講習会 (Windows、MACでも利用可能で可視化ソフトも充実)

◆マテリアルズインフォマティクスツールなど

- ・チュートリアル (MatNavi利用方法、データ駆動型物質科学に関連したツールの紹介)
- ・ハンズオン講習会 (ツールを利用したデータ駆動型物質科学研究の実習)
- ・AI技術で利用される“TensorFlowやR”などツールを活用した物質科学研究の事例紹介

◆その他

- ・企業コンソーシアム、企業共同組合等に対するのプログラム講習会、勉強会等の支援と解析ニーズの調査
- ・3Dプリンターによる分子・結晶模型の作製法の講習会