



実験データ解析手法 の革新

計算科学とデータ科学の融合

東京大学 杉野 修

東京大学における物質科学の基礎研究

柏キャンパス

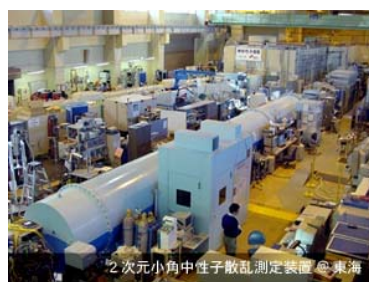
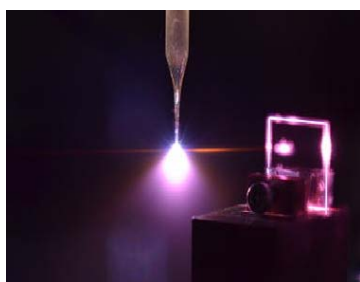


本郷キャンパス



物性研究所
新領域創成研究科
理学系研究科(物理学等)
工学系研究科(物理工学等)

大型研究施設(レーザー、放射光X線、中性子、強磁場、スパコン)の活用



計算物質科学コミュニティー

- 共同利用施設「物性研スパコンセンター」
- (~H27)HPCI戦略プログラム(京コンピュータ)
 - 分野2「新物質・エネルギー創成」
- (H27~)ポスト「京」プロジェクト
 - 重点課題7(物性研代表)、5(分子研代表)、萌芽的課題1a(金研代表)
- (H24~)元素戦略プロジェクト
 - 磁石、電子材料、構造材料、触媒・電池

本調査研究が目指すもの

東京大学(柏キャンパス等)での卓越した物質科学基礎研究
つくばの研究機関での卓越した産業化研究:AIST, NIMS,..

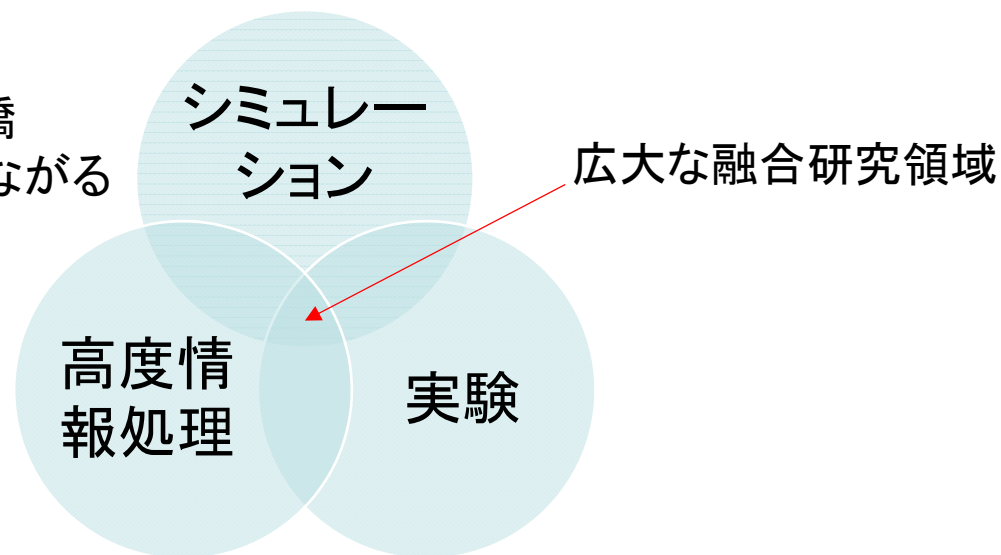


これらの物質科学を起点とした価値創造(材料応用、デバイス化等)の潜在力

「経験と勘のみに頼った研究からの脱却」、「実験・計算機シミュレーションの連携」
→今回、個人ベースの連携から組織的連携への進化を目指す



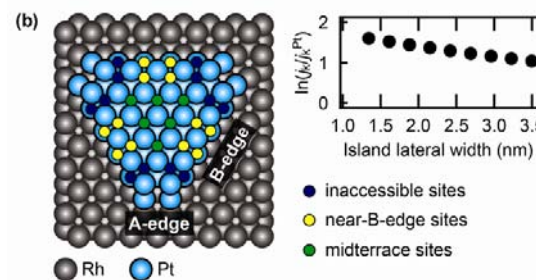
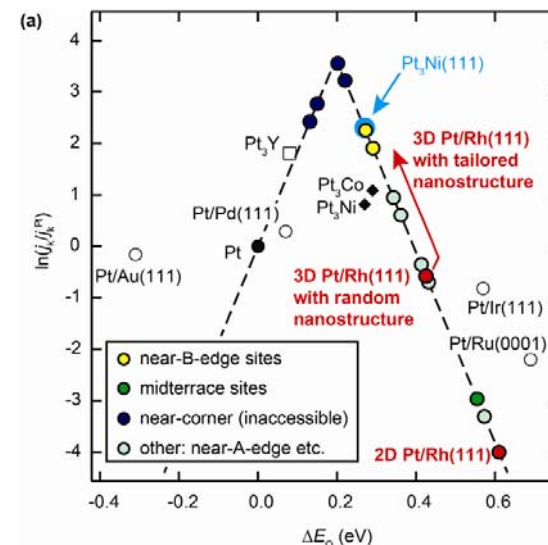
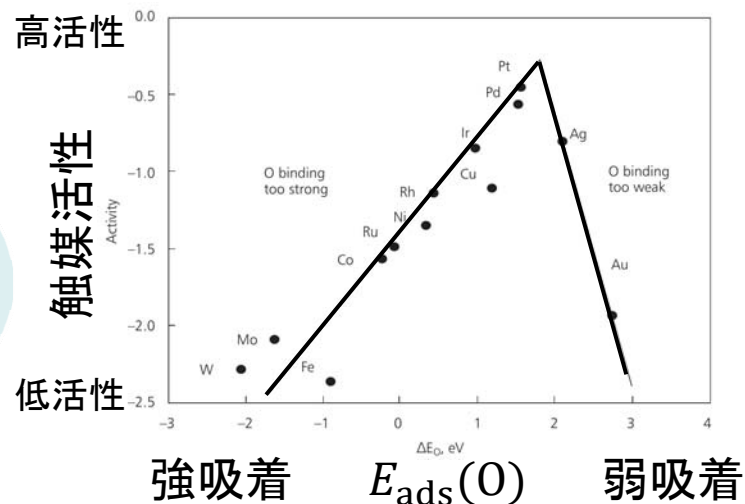
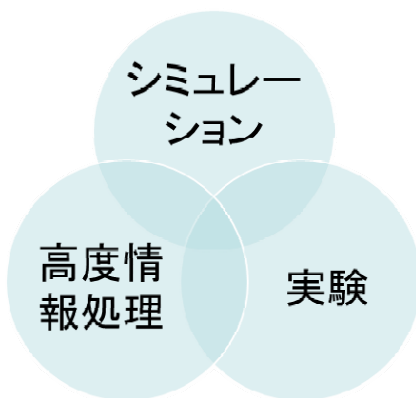
高度情報処理技術がもたらす新たな架け橋
アカデミック研究と産業応用の架け橋につながる



古典的な成功例：燃料電池触媒の火山型プロット



- 電極触媒の設計 (脱白金、低白金化)
- 酸素還元反応 ($O_2 + 4H^+ + 4e^- \rightarrow 2H_2O$) の最適化
- 触媒活性と酸素吸着エネルギー $E_{ads}(O)$ の関連
 - 火山型プロット
 - $E_{ads}(O)$ が descriptor
- 理論計算による合金の最適化と実験による検証

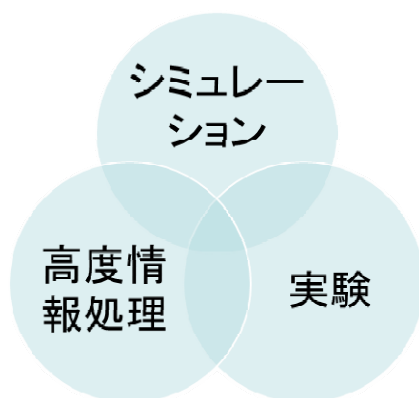


Serendipityに頼らないアプローチ

- 微視的情報の解析
 - 例えば、X線等の分光学的手法を用いた電極の構造、電子状態の測定
 - 高度な電子論や統計物理を用いた解析
- 巨視的情報の解析
 - 制御された電極界面の電気化学測定
 - 第一原理化学反応論等を用いた解析
- 情報のデータベース化と情報間の関連付け

解析不能なため捨てていた情報の活用 (pressure gap, material gap領域の情報の意味づけ)

ネットワーク解析、人工知能、...



↓
 系統的な物質・材料予測

物質・材料全般が対象



【物質・材料】

二次電池、太陽電池、磁石・磁性体、熱電材料、半導体、誘電体、
金属構造材料、高分子材料、ナノ構造複合材料、生体関連物質など

【関連する計測技術】

構造解析(X線や中性子回折実験、電子顕微鏡、走査プローブ顕微鏡など)
各種スペクトロスコピー、熱測定など

TIA内部の理論研究者がすべての材料や実験・計測技術をカバーできるわけではないが、現状で対応できない対象を見つけることも有意義

計算物質科学のcore competence

シミュレーションソフトウェアおよび関連情報のポータルサイト



<http://ma.cms-initiative.jp/ja>

掲載アプリ

- 電子状態計算(固体物理分野)
- 電子状態計算(量子化学分野)
- 分子動力学計算
- 可視化・モデリング
- データ解析・補助ツール
- 強相関係・有効模型計算
- 連続体シミュレーション
- データベース

「見える化」

- 国内外のアプリの機能・特徴を紹介
- マニュアル・チュートリアル充実化
- 情報共有、意見交換の場の提供

「ポータル化」

- 開発環境・ツールの提供
- ライセンス、ドキュメント作成や講習会開催のための情報提供

コミュニティが連携して作る時代へ
飛躍的に幅広い問題への対応が可能に

TIA連携によるbreakthrough

実デバイス、実触媒、生体系など高度に不均一な系

測定やシミュレーションの限界

多次元かつ大量の高品質な測定データには情報がふんだんに存在。

埋もれた情報を抽出する技術の欠如が原因。

「インテリジェント計測・解析手法」の構築により克服し、基礎科学と産業のギャップを埋める。そこには大きな可能性が広がる。



実験結果の解析手法の革新が必要

実験研究者を巻き込みながら、コミュニティーレベルで取り組む

まずは、連携のための体制作りから



TIAポスター交流会

日時:平成28年8月30日(火) 午後

場所: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、懇親会)

内容:ショートプレゼンテーション(一人1min) + ポスター発表 + 懇親会

TIA関連機関の計算科学、データ科学、数理科学研究者、およびによる計算科学やデータ科学に対してニーズのある実験・計測研究者によるポスター発表会。

※大学院生も含め、なるべく多くの発表を募る。50～100件を期待。

※原研やJASRI、理研など、TIAに参加していない機関の研究者も歓迎する。

- TIA参画機関に所属する計算科学、データ科学、数理科学研究者が、特定のプロジェクトや機関の利害に縛られず、気楽にコミュニケーションできる場を設ける。
- 実験・計測の研究者(産業界も含む)を呼び込むことで、計算科学やデータ科学への新しいニーズを開拓し、あわせて研究者のマッチングを図る。
- これらの活動を通じて、共同研究や新規プロジェクト提案の可能性を探る。

【世話人】

常行真司(東大)、杉野修(東大)、宮崎剛(NIMS)、伊藤聡(NIMS)、三宅隆(産総研)、大谷実(産総研)、櫻井鉄也(筑波大)



現在の構成員

代表 常行真司

参加者 川島直輝、杉野修、野口博司、加藤岳生、尾崎泰助、
藤堂眞治、野口良史、笠松秀輔、吉見一慶、
三澤貴宏、河村光晶、本山裕一、古宇田光

今後、データ科学研究者等の参画による充実化を図る