

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社会実装

Experimental data analysis coordinated with computational science

目的 Purpose

- シミュレーションやデータ科学的手法により先端実験装置でえられる物質・材料データを解析するスキームを検討し、講習会等を通じて産業界や実験家などに紹介することで社会実装を図る。
- Study a scheme to analyze material data obtained by advanced experiment equipment using simulation and data scientific method, and introduce it to industry and experimental researchers

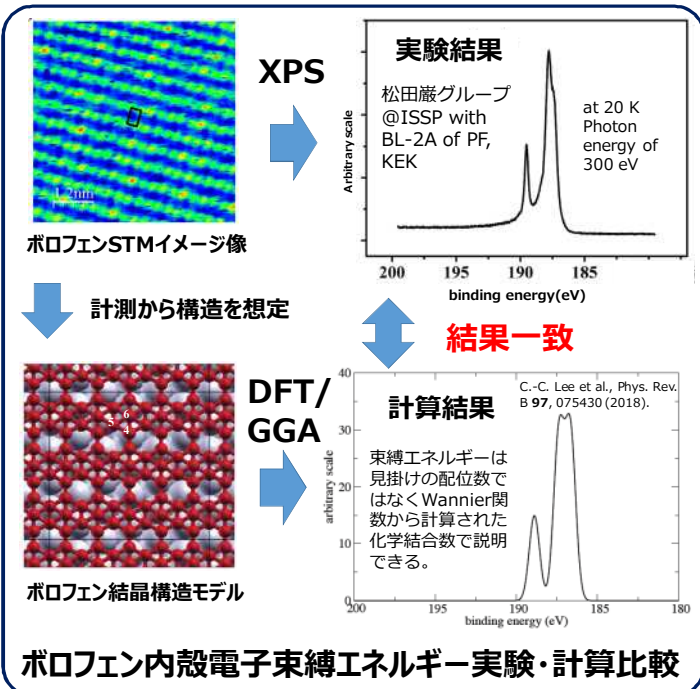
概要 Outline

- 参画機関の若手研究者によるポスター交流会により新たな連携模索
- TIA連携講座等で計算・データ関連ツール利用促進と、新ニーズ・課題探索
- 国家Pjで実施している研究課題で不足している研究領域の調査
- Promotion of new collaboration at the poster presentation meeting
- Search for new seeds and themes in the application course
- Investigation of missing research areas in national projects

実験・計算連携による物質構造の特定

Specification of materials with experiment and calculation

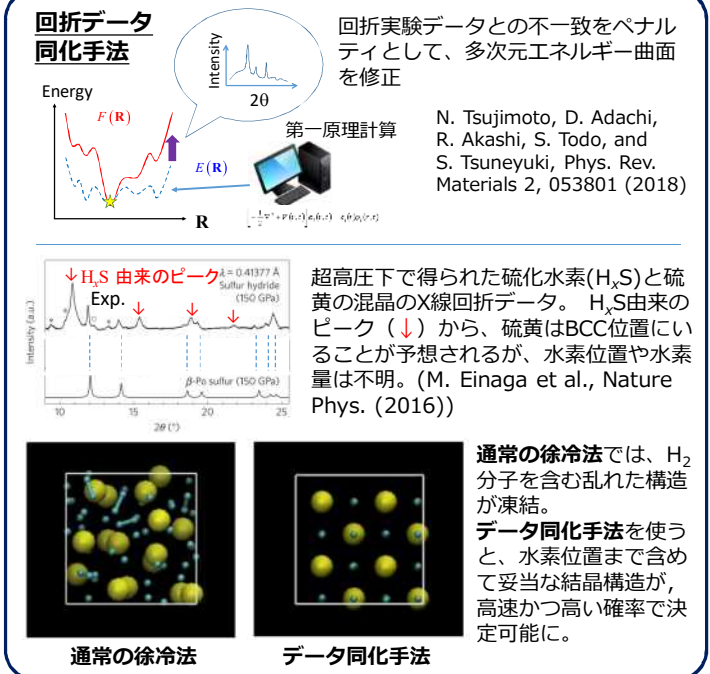
- ◆ボロフェン (B: β_{12} 構造) の未知構造を計算で特定
- ◆配位数が多いのに結合数が少ない特殊な結晶構造を発見
→特殊な構造がもたらす特異な物性がないか今後調べる



データ同化による結晶構造予測

Crystal structure prediction by data assimilation

- ◆超高压下やナノ結晶などのわずかなX線回折データを利用して、
シミュレーションによる結晶構造予測を劇的に加速する新手法
- ◆物質科学における「データ同化」の実現



今後の展望と課題

- ◆TIA連携講座等を継続するため、企業参加者から参加料を徴収する等の財源確保を検討。
- ◆計測と計算のデータ同化による物質材料の探索を迅速に実施する革新的な物質科学解析手法を実現に向けて、シーズ・ニーズのマッチングを図る。