

計算と計測のデータ同化による

革新的物質材料解析手法の調査

Experimental data analysis by assimilating simulation data

目的

- ・ 迅速に物質構造や機能の探索、化学反応経路探査等の理論的解釈、物性影響因子の特定等を行うための、最先端の計測、計算、データ科学を融合したデータ同化解析技術の実現可能性調査。
- ・ データ同化技術に活用する、産官学で共有可能な価値の高いデータベースへのデータ蓄積方法の調査。

現状課題

- ・ 放射光、量子ビーム、レーザー光等の高輝度化、検出器の感度向上等に伴い、計測データが大容量化し、処理が追いつかずデータ解析が後回しになっている。
- ・ 新しい計算手法、アルゴリズムの開発とスーパーコンピュータのコデザインにより、物質科学計算の精度や信頼性が向上している。
- ・ 物性データから結晶構造を予測するなどの逆問題では、十分な収束精度が得られず、解析が困難となる場合がある。
- ・ 近年、AI解析ツールを駆使したデータによる材料探査手法が検討されており、その解析に必要なデータの蓄積方法等が議論されている。

実施概要

- ・ 東大柏IIやNIMS等に整備されるITインフラを活用した物質科学研究プラットフォーム構築が目標。
- ・ KEK-PF、J-PARC、SPring-8等の大型研究施設からの大容量計測データと、第一原理や統計的、古典的な計算データを同化させた革新的な物質材料解析手法、産官学で共有する計算・計測のデータベース構築のあり方を調査。

社会還元

成果

産業界・学界で 研究開発に活用

◆国際競争力強化

新現象説明 基礎 物性・機能予測 デバイス設計 応用

利用

課題抽出し フィードバック

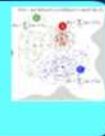
Open!
SINET5
エコシステム

計算・計測データ同化解析手法

大規模・高精度シミュレーション (物性研・NIMS・筑波大)



データ駆動型
材料探査
(NIMS・筑波大
物性研)



先端実験・
計測施設
(SPring-8
J-PARC、KEK-PF 等)

最先端技術公開

◆物質科学プラットフォーム拠点



- ・ データ利用 (open/close)
- ・ 講習会/ワークショップ/講義
- ・ コンソーシアム

手法 普及

◆物質計算アプリ、データベース連携



MateriApps

物質科学計算アプリ



MatNavi
NIMS 物質・材料データベース

物質構造材料データ